

2014 高等固体物理复习知识点明细 授课老师:李震宇教授 整理人:黄晓 整理模板:往届师兄 第一章与第二章明细部分见手写(并非点点对应).三四五三章和三个专题都是手动打的电子版. 公式打得想吐.= 2014/6/14 于 1304 望后继有人将第一二章变成电子版.

## 第一章 绪论

### 1. 范式的定义及科学演化的方式

答: 样式作为样本或模式的例子; 前范式阶段、常规科学阶段、反常阶段、危机阶段

科学革命阶段、新范式阶段。

### 2. 固体物理的范式的建立, 内容和定量描述

A

1、晶体学: 晶体周期结构的确定 2、固体比热的理论: 初步的晶格动力学理论 3、金属导电的自由电子理论: Fermi 统计 4、铁磁性研究: 自旋量子理论 5、电子衍射的动力学理论(Bethe)、金属导电的能带理论(Bloch)、基于能带理论的半导体物理(Wilson) 6、标志: 1940 年 Seitz “固体的现代理论”

B

内容: 核心概念: 周期结构中波的传播 (1946 年 Brillouin 著)、晶体的平移对称性(周期性)、波矢空间(倒空间)、强调共有化的价电子以及波矢空间的色散关系  
焦点: Brillouin 区边界或区内某些特殊位置的能量-波矢色散关系; 晶格动力学+固体能带理论

C

定量描述: 标量波 (电子)、矢量波 (电磁波)、张量波 (晶格波)

### 3. 光子晶体的定义和应用

定义: 在高折射率材料的某些位置周期性出现低折射率的材料. 这种光的折射率指数的周期性变化产生了光带隙结构, 控制着光在晶体中的运动

应用: 可以改变原子的自发辐射速率、可以用于制造光子晶体光纤

### 4. 量子化学的范式的内容

量子化学研究的对象是原子, 分子的结构和性质, 方法是用量子力学求解体系波函数。所用理论 1、价键理论(电子配对理论), 主要思想是电子两两配对形成定域的化学键; 2、分子轨道理论: 主要思想: 一个分子中的所有轨道都扩展到整个分子上 (原子轨道的线性组合)

核心思想: 实空间中的几何位形, 电子的局域化, 电子密度的集中和电荷的转移.

和固体能带理论范式的差别: 一个强调周期结构, 主要处理非局域态; 一个强调原子相关, 键合的形成, 主要处理局域态

和固体能带理论范式的联系: 分子轨道理论类似于紧束缚的单电子近似

### 5. 凝聚态物理的范式 (概念: 元激发, 序参数, 对称破缺等)

凝聚态物质世界都是对称破缺的产物,

范式的核心概念: 对称破缺。四个层次, 相互关联: 基态, 元激发, 缺陷和临界区域

### 6. 准晶的定义

准晶是固态物质的一种新的有序相, 同时具有长程准周期平移序和晶体学上不允许的长程取向对称.

### 7. 液晶的定义及其分类

液晶相: 具有各向异性的液态, 由各向异性分子构成, 且分子倾向定向排列。液晶: 凡出现液晶相的物质

向列型液晶、近晶型液晶、螺旋状液晶

### 8. 相变的定义及其分类

定义: 一个多粒子系统在不同的温度和压强或其他外部条件下可以处在不同的状态, 不同状态之间的转变叫相变

一级相变或不连续相变: 热力学势连续, 一阶导数不连续的状态突变; 二级相变或连续相变: 热力学势和一阶导数连续, 二阶导数不连续的状态突变

条件: 无规则起伏势能分布宽度  $W$  与带宽  $B=2ZV$  之比大于临界值时, 无序系统中所有的本征态都是局域态.

### 9. Landau 的二级相变理论

Landau 的二级相变理论: 强调对称性的重要性, 对称性的存在与否是不容模棱两可的, 高对称性相中某一对称元素突然消失, 就对应于相变的发生, 导致低对称相的出现.

## 10. 临界现象

临界点：两级相变的相变点、临界现象：物质处在或接近于临界点时所表现出来的独特行为

## 11. 重整化群方法

将关联长度发散的临界点与非线性变换的不动点联系起来，建立一种与传统的统计方法不同的分析途径，这种途径不直接配分函数，而是研究保持配分函数形式不变的变换特性。三个步骤：（1）粗粒化；（2）重新标度；（3）重整化

## 12. 元激发的定义，分类

定义：有相互作用的多粒子体系的低能激发态，可以看成是一些独立的基本激发单元的集合，它们具有确定的能量，有时还有确定的动量。

分类：集体激发（多为 Bose 型）：例如：离子-离子相互作用引起的晶格振动--声子(phonon)；(2)磁性材料中的自旋-自旋相互作用引起的自旋波--磁振子(magnon)；(3)金属中电子气相互作用引起的等离子体集体振荡--等离子激元(plasmaron)；(4)光子和光学模声子耦合一极化激元(polariton)

个别激发（多为 Fermi 型）：(1)正常金属中相互作用的电子，变换成屏蔽电子或准电子，其有效质量增大(quasi-electron)；(2)离子晶体中的电子或空穴在运动时带着周围极化场一起运动而形成的极化子(polaron)；(3)半导体中的电子和空穴对(electron-hole pair)

## 13. 等离激元

电子气相对正电背景的振荡：等离子体振荡。振荡的能量取值是量子化的，元激发为等离激元。

## 14. 极化子的定义及其分类

将电子连同由于它对周围极化所构成的总体视为准粒子，叫极化子(polaron)，极化子是慢电子与光学模纵声子(LO)相互作用系统的准粒子。分类：大极化子，小极化子

## 15. 激子的定义

能带论中在带边产生独立电子一空穴对的激发能量元激发不再是形成独立的电子和空穴对，而是形成电子与空穴的束缚态，其所需元激发能量低于  $E_g$  激子：电子

和空穴束缚对

## 16. 广义刚度和缺陷

广义刚度：描述有序相(对称破缺)体系在能量取极小的情况下对外界的某种响应。它反应了有序相中长距离上粒子之间存在关联(相邻粒子间的相互作用是这种关联的基本原因)

广义刚度的破缺→拓扑缺陷的产生（涡线，位错，畴界）缺陷结构：比元激发更高的激发态

# 第二章 无序

## 1. 无序

体系的性质不再能以长程有序的理想晶体作为零级近似，无序作为微扰来解释的情形。

## 2. 无序的类型

(1)成分无序 (2)位置无序 (3)拓扑无序

## 3. 非晶态固体的制备

常见方法：液相急冷法，气相沉积法

一般方法：溅射法，真空蒸发沉积法，电解和化学沉积法，及辉光放电分解法

新方法：激光加热法，离子注入法

## 4. 非晶态固体结构的描述与检测

原子的径向分布函数（RDF）：描述原子分布状态；

扩展 X 射线吸收精细结构谱（EXAFS）吸收边：每种元素在某些特定能量处出现吸收系数的突变。

## 5. 非晶态固体的结构模型和缺陷

(1) 刚球无规密堆模型（非晶态金属或金属合金 DRPHS）Finney:793 个硬球模型

无规密堆有一个明确的堆积密度上限 0.6366;密堆晶体 0.7405

非晶具有一些不同类型的局域短程序。以原子为中心作其最近邻的连心线。以这些

连心线为棱边所构成的多面体→Bernal 多面体。

## (2) 连续无规网络模型 (CRN)

以共价结合的非晶态固体,最近邻配位与晶态类似。用球代表原子位置,线段代表大小,线段间的夹角代表键角,所有球和线段组成的网络—非晶网络模型

## (3)非晶中的缺陷

非晶半导体 i) 悬挂键 ii) 微孔 iii) 杂质

## 6. 扩展态

所有电子在有序晶格中作公有化运动—>扩展态

## 7. 局域态

在晶体中引入缺陷,周期性局域破坏,杂质态局域在杂质附近

## 8. Anderson 局域化

定义:

热力学极限下的体系 (N,V 无限大 N/V 有限), 设 t=0 时 1 格点(或附近)有一个电子, 经过较长时间后在该格点找到电子的几率振幅为 A(t):

A(t)=0 扩展态 A(t)≠0 局域态

## 9. Thouless 公式定性说明

强无序情况 W/V>>1

考虑有一个电子定域在格点 l,由于相互作用可以使邻近格点 l'

上的电子波函数混入,由量子力学微扰理论(一级):

## 10. 迁移率边

$\delta < \delta_c$  无序系统既存在扩展态,也有局域态,扩展态在 TBA 能量中心,局域态在

带尾,并有一个划分扩展态与局域态能量的分界  $E_c$

任意 E 态的局域化条件:

$$\delta = \frac{W}{2Z|V|} > \delta_c(E) \equiv \frac{e}{\sqrt{1-(2E/W)^2}} \left| \frac{1-2E/W}{1+2E/W} \right|^{E/W}$$

对于给定  $\delta(W,|V|)$ ,  $|E| \uparrow, \delta_c(E) \downarrow$

## 11. 态密度

在无序固体中,波矢  $K$  不再是好的量子数. 但不论是晶态还是非晶态,体系的总自由度不变,因而模式密度,能态密度的概念依旧有效。

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_i \delta(\varepsilon - \varepsilon_i)$$

## 12. 晶态和非晶态的态密度曲线的异同

晶态态密度曲线上的一些结构,如 van Hove 奇异被抹平了。奇异是晶体具有平移对称性的结果,在非晶态材料中,这种长程序不复存在。结构细节被抹平,可定性的用不确定原理说明。由于无序的存在,电子因频繁被散射,平均自由程缩短。第二,有一定域态的带尾,两相邻带尾之间没有许可态的区域称为带隙,但有时,带尾可交叠,带间态密度低的区域称为赝能隙。

## 13. Anderson 转变

由于载流子浓度或无序程度的改变,把费米能级推过迁移率边是发生的金属<->绝缘体转变,或定域<->退定域转变,一般称为 Anderson 转变。EF 处在扩展态为金属,EF 处在局域态为绝缘体。无序引起的相变叫 Anderson 相变。

## 14. 渗流相变

每格点被占据的几率为 P,不占据的几率为 1-P。相邻格点都被占据,这些格点形成一个集团。当 P 增大,集团的大小增大。P 达到一个临界点,点阵上就出现一个无限大集团—>渗流相变。

渗流体系最基本点: 阈值

P<Pc: 有限集团 P>Pc: 无限集团

P->Pc-0:出现一个初始无限大集团

Pc:渗流阈值或渗流临界值

## 15. 渗流相变是一个二级相变

序参量: 渗流几率  $\rho(P)$

定义：当占据几率为时，点阵上任意格点属于无限大集团的几率。

### 16. 自相识性

缩放对称性，即不管对结构作怎样的放大与缩小，结构看上去仍是相同的。

### 17. 跳跃电导

温度  $T \rightarrow 0$  时，体系的电导率  $\sigma=0$ , 绝缘体

$T \uparrow$ ，电子可因热激活，从一个定域位置跳到另一个，产生跳跃电导

$\vec{\psi}_i, \psi_i \rightarrow \vec{\psi}_j, \psi_j$  电子从  $i$  隧穿到  $j$  的两个决定因素

(1) 两个态波函数的交叠

$$\psi \propto \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_i|/\xi) \rightarrow \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_j|/\xi) \rightarrow \exp(-|\vec{r}_j - \vec{r}_i|/\xi)$$

(2) 两个格点的能量差

$$\psi \propto \exp(-\Delta\varepsilon / K_B T) \rightarrow P \propto \exp(-\Delta\varepsilon / K_B T)$$

$$\therefore P \propto \exp(-2R/\xi - \frac{\Delta\varepsilon}{K_B T})$$

低温下(2)比(1)重要 变程跳跃

高温下(1)比(2)重要 定程跳跃

$$P \propto \exp(-2R/\xi - \frac{\Delta\varepsilon}{K_B T}) \quad R \text{ 和 } \Delta\varepsilon \text{ 都存在涨落}$$

$\Delta\varepsilon$  的平均值估算：

单位体积内的态密度  $g(\varepsilon)$ ，具有尺寸  $R$  的  $d$  维空间总状态数  $g(\varepsilon)R^d$

靠近 Fermi 能级处平均能量间隔： $\Delta\varepsilon = \frac{a}{g(\varepsilon)R^d}$   $a$  为一适当常数

$$\text{最可几 } R \text{ 的计算: } \frac{d}{dR} \left[ \frac{2R}{\xi} + \frac{a}{g(\varepsilon)R^d K_B T} \right] = 0 \rightarrow R_0 = \left[ \frac{ad\xi}{2g(\varepsilon)K_B T} \right]^{\frac{1}{d+1}}$$

设最可几跳跃支配了跳跃电导率：

$$\sigma \propto e^{-C(T_0/T)^{\frac{1}{d+1}}} \quad K_B T_0 \sim \frac{1}{g(\varepsilon)\xi^d}$$

$$d=1, \quad \frac{1}{2} \quad d=2, \quad \frac{1}{3} \quad d=3, \quad \frac{1}{4}$$

$$\text{定程跳跃: } \Delta\varepsilon_\xi \sim \frac{1}{g(\varepsilon)\xi^d} \rightarrow \sigma \propto \exp\left(-\frac{\Delta\varepsilon_\xi}{K_B T}\right)$$

### 18. 非晶半导体的直流电导与晶态半导体不同之处

(1). 非晶态半导体存在扩展态、带尾定域态、带隙中的缺陷定域态。这些状态中的载流子都可能对电导有贡献。

(2). 非晶态半导体中的费米能级通常是“钉扎”在带隙中，基本不随温度变化。

钉扎: Fermi 能级的位置不因少量的浅施主和浅受主杂质的引入而发生变化。

Fermi 能级之上有带正电的状态

Fermi 能级之下有带负电的状态

两者的补偿作用使 EF “钉扎”

### 19. 非晶态半导体电导

半导体电导率： $\sigma = ne\mu$

非晶态半导体电导(一种载流子)

(1). 带隙中缺陷定域态  $\rightarrow$  带隙中缺陷定域态

$E_F$  处在缺陷定域态的能级之中，只是在  $E_F$  附近  $K_B T$  范围内

电子才对电导率有贡献(电子密度为  $N(E_F)$ ):  $\sigma = \sigma_2 e^{-E_2/K_B T}$

$E_2 = W_2$  为缺陷定域态之间跳跃平均激活能

(2). 带隙中缺陷定域态  $\rightarrow$  导带尾定域态

由  $E_F$  激发电子到导带尾部中的电子浓度  $\propto e^{-(E_A - E_F)/K_B T}$

$$\sigma = \sigma_1 e^{-E_1/K_B T} \quad E_1 = E_A - E_F + W_1$$

$W_1$ : 导带带尾之间跳跃平均激活能

(3).带隙中缺陷定域态 → 导带扩展态

与激发到导带的电子浓度成正比, 迁移率依赖温度变化小

$$\sigma = \sigma_0 e^{-E/K_B T} \quad E = E_C - E_F$$

## 20. 非晶态金属的电阻率及其温度关系

1)非晶态金属的电阻率高于晶态金属材料的电阻率

100-300 $\mu\Omega\text{cm}$

“剩余电阻”<-无序结构导致的, 数值较大

2) 非晶态金属的电阻率温度系数  $\alpha = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT}$

$\alpha$ 特别小, 其绝对值小于 $10^{-5}$

结构无序和杂质贡献大于原子热运动贡献

3)很多非晶态金属在很宽范围内有负的电阻温度系数

4)Mooij经验规律

$\rho < 100\mu\Omega\text{cm}$   $\alpha$ 为正  $\rho > 150\mu\Omega\text{cm}$   $\alpha$ 为负

5) 非晶态金属的电阻率随非晶结构的稳定性而发生不可逆变化. 当温度升高开始晶化时, 电阻率将发生突变->估计非晶态金属的晶化温度

## 21.Kondon 效应

含有极少量磁性杂质的晶态金属在低温下出现电阻极小的现象。

s-d 散射机制:产生电阻极小的必要条件是局域自旋具有翻转自由度。

## 22.双能级隧道态模型理论:

非晶态中存在 2 个等价的原子组态

$$\rho(T) \propto \ln(k_B^2 T^2 + \Delta^2) \quad \Delta \text{为2个等价的原子组态的能级差}$$

## 23. 定域的标度理论 (推导)

## 24. 非晶态半导体的光吸收和光致发光

1)非晶态的本征吸收: 不需选择定则。吸收系数高,非晶太阳能电池

2)非晶的吸收边附近

A: 高吸收区 价带扩展态->导带扩展态

B: 指数区 价带扩展态->导带尾定域态  
定域态-> 扩展态

C: 弱吸收区 和杂质缺陷有关

3)原子振动与光相互作用准动量守恒关系的限制, 整个频率范围内所以的振动模都有贡献, 红外、拉曼光谱比晶态的弥散、光滑

4)在非晶态半导体、特别是硫系非晶态半导体中, 存在发射光子的频率低于吸收光子频率的现象,Stokers 效应。

## 25. 无序系统的应用

激光打印机的原理

1) 吸鼓带电

感光鼓是在导电基体表面上涂有硒或其它光电导材料层, 光电导层在光照时的电阻率下降。

2) 扫描曝光

用受被打印内容调制的激光束对感光层扫描曝光, 受光照区域的电阻率下降, 表面电荷被中和而消失, 在感光层上形成由静电荷分布构成的潜像 (电荷图象)。

3) 静电成像

用含有炭精粉粒的显像剂与感光层接触, 在静电场的作用下, 炭精粉粒附在感光层的曝光区域上, 形成可见的炭精粉图象, 这过程也称显像过程。

4) 着色转印

打印纸与已经显像的感光体接触, 同时采用电晕带电体从纸的反面加电场, 这时感光体表面的显像剂转移到打印纸上完成转印。

第一章与第二章手抄的,附在这两页之后对照看.后面采取电子录入手段.

下面是第一二两章的手抄拍照图。字迹极其难认, 望后继有人变成电子版。

高等固体物理 概念集

基于2012年柯金老师的PPT为主体,李震宇教授的PPT为补充。

Chapter 1: 概论

1. 凝聚态物理定义: 从微观角度研究相互作用的多粒子系统组成的凝聚态物质(固体与液体)的结构与动力学过程,及其与宏观物理性质之间关系的一门学科。

2. 范式

范式作为研究或理论的例子,具有较窄的适用范围,比如人们对于固体的理解。一套方法的可以作后续研究过程的范式的前人积累下来的研究例子。范式的内容

- 3. 核心: ① 周期性结构中波的传播; ② 晶体的平移对称性(周期)
- ③ 波矢空间(倒空间)
- ④ 强调量化的价电子以及波矢空间中色散关系。
- 波矢空间的基本单元 Brillouin区, 其边界在区内某些特殊位置的能量/k关系。

定量表述:

3.1 平面电子波. ~ Bloch定理/处理范式  
 路径类似(将原子格看作不动)自由电子(将其他电子看作背景场), 周期性中由子  
 $(-\frac{1}{2}v^2 + V(r))\psi(r) = E\psi(r)$

$V(r)$ 为周期性的电子势场。

$V(r) = V(r+R_n)$

设波函数  $\psi(k,r) = e^{ik \cdot r} u_k(r)$ ,

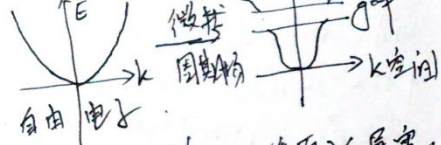
$u_k(r)$ 是周期函数:  $u_k(r+R_n) = u_k(r)$

其中  $k = \frac{2\pi}{a}$  是波矢, 波函数电子波的相差; 根据周期性差有  $E_n(k+a) = E_n(k)$ .

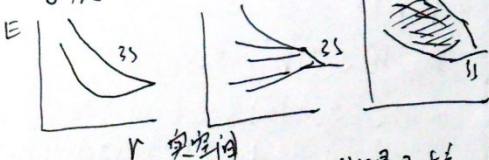
$(i\hbar \partial_t \psi(r,t)) = i \cdot 2\pi n$ ,  $n$ 为整数,  $R_n$ 为格位平移矢量,  $a$ 为相应倒空间平移矢量。

3.2 固体能带结构的两种理解

理解固体物理中处理固体电子结构的两种方式, ①自由电子也以+周期势场近似。



② 原子能级图景,  $N$ 重原子后展宽, 学带理论, 量子化处理。



③ 轨道杂化如此, 只是能级不一样。

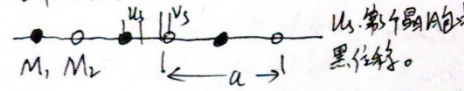
3.3 电磁波: 电磁波 Maxwell方程.

$$\mu \cdot \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\nabla \times \vec{E} \quad \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \nabla \times \vec{H}$$

$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{x})$ ,  $k$ 波矢  $\omega$ 频率  
 比部分内容少, 自测不去。

3.4 张量流: 晶格振动, 声子的描述。

这个概念从一维复式格子说起。



设  $M_1, M_2$  之间的作用为弹性的, 弹性系数为  $c$

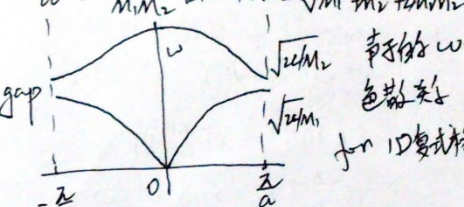
$M_1 \frac{d^2 u_1}{dt^2} = c(u_2 + u_{1-1} - 2u_1)$

$M_2 \frac{d^2 u_2}{dt^2} = c(u_1 + u_{2+1} - 2u_2)$

设  $u_1 = u \exp[-i\omega t - ika]$   $k$ 为波矢

$u_2 = v \exp[-i\omega t - ika]$

按部就班可以推导出一个光学支一个声学支



这个值得了解基本的推导过程。

三维复式格子, 一个原胞  $n$ 个原子, 推导过程略去, 只记结果:

3支声学波,  $3n-3$ 支光学波。

3.5 固体物理范式的开拓与深化。

- 无 + 量子相干性
- 非晶、液晶、准晶、液体; 不同的散射介观体系 ... 后面的内容。

4. 光子晶体: 高折射率材料的某些周期性出现新材料, 光的新频率指数发生周期性变化性光带隙结构, 可以控制光在晶体中的运动。

一维, 二维, 三维。

光子晶体以半导体。

结构: 不同介电常数介质的周期性分布 vs 周期性势场。

对象: 在晶体中的传播, 以电子输运方程:  $\{ \nabla \times [\frac{1}{\mu} \nabla \times] \} \psi(x) = \frac{e}{\hbar} H(x)$

$[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x)] \psi(x) = E \psi(x)$

特点: 电子有限度, 光 vs 波函数, 能量

特征: 对称禁带, 表面态, 缺陷态局域模式, 光子带带, 缺陷态, 表面态。

光子晶体以原子尺寸。

完全光子晶体中, 有一部分频率的光的传播不被允许, 也就是说这部分光无法在光子晶体中传播, 会被100%的反射回去 → 光子晶体光纤。相比于传统的射线工作的普通光纤, 无损耗,  $N$ 种波长可工作, 直径单模。

在上面讨论的禁带光子晶体中, 若在缺陷, 则会在带隙中出现一种光波可走的窄带, → 特定波长的激光发生器。控制光的运动轨迹。

5. 量子化学范式

5.1 量子化物理对象: 原子、分子的结构与性质

使用办法: 求解薛定谔方程,  $N$ 体计算法, for 复杂巨大的分子。  
 ④ 价键理论, 电子配对。  
 电子两两配对形成定域的化学键。  
 原子轨道相互重叠成键, 重叠程度能过强, 重叠方向能过方向, 变化。

④ 轨道理论. 原子轨道的线性组合得  
到整个分子的轨道.

组成有粒子的轨道的条件. 能量相近, 对称匹  
配, 重叠.

具体处理式: 原子中的电子数外列出 (作电  
子); 成键轨道能量低; 反键轨道能量高;  
能量由低到高填入电子; 键级 =  $(n - n') / 2$ ;  
正值则存在, 等于 0 则不存在.

### 5.2 壳层

核心思想: 空间中以向位形, 电子层填充,  
电子密度的集中和电荷的转移.

与溶剂解释理论或理论的区别. 前者处理  
非局域态, 后者处理局域态; 前者强调  
周期性结构, 后者强调原子间相互作用;  
后者类似于 TBA.

### 6. 凝聚态物理的范式

Landau & Anderson 的范德瓦耳斯,  
无激发序参量, 对称破缺. 有序

### 6.1 对称性与对称破缺

对称性是相变中某些物理量宏观观的  
假说, 不同观测量均存在  $\rightarrow$  守恒律.  
一旦观测量可以观测, 对称性破缺了.

简单对称性: ① 全同粒子互换 ② 连续时空变换  
粒子, 场论 ③ 分立变换 空间/时间/流  
④ 规范变换. 守恒定律  
物理学中的对称性.

空间对称. 绝对空间位置. 动量.

时间 ~ 绝对时刻点 能量

旋转 绝对空间方向 角动量  
空间流演 绝对存在 宇称.  
时间 ~ 绝对时刻点 电荷共轭  
粒子置换 全同粒子置换 Bose/Fermi 统计  
规范变换 不同电磁态间相对电荷.

相应的凝聚态物质:  
空间平移 对称破缺  $\rightarrow$  晶体.  
空间流演  $\rightarrow$  超导体.  
时间 ~  $\rightarrow$  磁有序.  
规范对称破缺  $\rightarrow$  超导体.

守恒量与凝聚态物质.  
6.2 有序的基本, 秩序的相变  
多粒子体系: 统计力学 + 相互作用.  
有序-无序相变, 一种理解:

$F = E - TS$ ;  $T \uparrow$ ,  $S$  主导, 无序化;  
 $T \downarrow$ ,  $E$  主导, 有序化. (固-液变)

④ 也是与另一个特殊的凝聚态相-准晶.

其点群虽然是  $m\bar{3}5$ , 同时具有长程准  
周期性有序. 与晶体学不一样的长程取向  
对称. 与非周期性晶体: A 两种晶胞  
合一, A 的周期是 B 的有理数倍, 存在  
整数公倍数. (不存在点阵对称性)  
- 准晶, Fibonacci chain 的构造:  
粒子构造, 长短两种线段  $L, S, \frac{L}{S} = 1.618$ .

$L \rightarrow LS, S \rightarrow L$ . 有. 迭代  
 $L \rightarrow LS \rightarrow LSL \rightarrow LSLLS \rightarrow$   
 $LSLSL \rightarrow LSLLSLS \rightarrow$   
 $L \rightarrow LS \rightarrow LSL \rightarrow LSLLS \rightarrow$   
 $LSLSLSL \rightarrow \dots$

④ 液晶. 定义: 液晶相为具有各向异性  
的液相, 由各向异性分子构成, 且分  
子倾向于定向排列, 相有液晶相的  
物质.

"各向异性", 一般熔点与各向同性之间  
的温度范围内出现.

类别: 向列型液晶, 简单排列:  $\begin{matrix} // \\ // \\ // \end{matrix}$   
近晶型, 几乎整齐排列:  $\begin{matrix} // \\ // \\ // \\ // \\ // \end{matrix}$   
层状液晶: 层状排列

具有一定的长程序, 热致液晶是单化  
合物 or 混合物混合而成; 溶致  
液晶 溶质与溶剂一起. 作用方式  
不同. 如何描述液晶的排列取向?

平滑矢量场 元素担当此任.  
转变: 几偏离了平衡状态下的指向向,  
展曲  $\nabla \cdot \vec{n} \neq 0$  弯曲  $\nabla \times \vec{n} \neq 0$  扭曲

$\vec{n} \cdot \nabla \times \vec{n} \neq 0$

### 6.3 相变与临界现象

④ 相变定义: 各粒子系统在不同温度与压强  
or 其他外部条件下可以处在不同的状态,  
不同状态之间转变叫相变.

一级相变, 二级相变 热力学势与  
一级导数变化率.

Landau = 二级相变: 高对称性相中某  
一秩序参量消失, 对在于相变与低对称性  
相的产生. 核心: 对称破缺.  
序参量: 描述体系偏离对称性的性

质与程度. 高温对称相中, 序参量为 0, 低温对  
称破缺后, 即有限值. 即序参量从 0 变为有  
限对应于相变的发生.

④ 临界现象  
临界点 (二级相变点) 附近, 体系表现出某  
些特殊行为.

eg 铁磁体. 序参量为磁化强度. 定义序  
参量指数. 无外场作用下系统的磁化热  
( $m(T, B=0)$ ) 在临界点附近的温度依赖.

$$= \begin{cases} \propto (T - T_c)^{-\alpha}, & T > T_c + 0 \\ \propto (T_c - T)^{-\alpha'}, & T > T_c - 0 \end{cases} \alpha = \alpha'$$

自发磁化  $M(T, B=0) \propto (T - T_c)^{\beta}$  ( $T > T_c - 0$ )  
零场磁化率  $\chi(T, B=0) = \lim_{B \rightarrow 0} \left( \frac{\partial M}{\partial B} \right)_T$   
 $\begin{cases} (T - T_c)^{-\gamma} & T > T_c + 0 \\ (T_c - T)^{-\gamma'} & T > T_c - 0 \end{cases} \gamma = \gamma'$

磁化强度  $M$  在  $T = T_c$  时.  
 $\lim_{B \rightarrow 0} M(T_c, B) \propto B^{1/\delta}$   
自旋密度关联函数,  $T = T_c$  时的行为:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \langle (S(r) - \langle S \rangle) (S(0) - \langle S \rangle) \rangle \propto r^{-(d-2+\eta)}$$

关联函数:  $G(r_1, r_2) = \langle \Delta m(r_1) \Delta m(r_2) \rangle$   
不同位置发生不相关性随距离增加而衰减.  
 $G(r) \propto \frac{1}{r} \exp(-r/\xi)$   $T = T_c$  时  $\xi \rightarrow \infty$

$\chi(r) \propto (T - T_c)^{-\nu}$ ,  $(T_c - T)^{-\nu'}$ ,  $\nu = \nu'$   
 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta, \nu$ . 六个量之间有  
标度律:

$$\alpha + \beta + \gamma = 2 \quad \alpha + \beta(\delta + 1) = 2$$

$$d \frac{ds}{s+1} = 2-\eta \quad v = \beta (H\delta) d$$

由部分的意思，将热描述体系的量看作仿照点阵也，温度的多次函数，并给出相应的表达式，定义仿照指数。

以上以所方程式的物理理论：

两个假定：体系的单格位自由能  $g(T, \theta) = g_0(T, \theta) + g_1(T, \theta)$ ， $t = \frac{T - T_c}{T_c}$ 。

$g_0$  平滑对称部分， $g_1$  奇异部分； $g_1$  是交叉函数： $g_1(t, \theta) = \lambda g_2(t, \theta)$  任意， $\lambda$  存在性。

自发磁化  $M = -(\partial g / \partial B)_T$ 。

磁化率  $\chi = (\partial^2 g / \partial B^2)_T$ 。

恒场比磁化率  $\chi_B = -(\partial^2 g / \partial T^2)_B$ 。

具体结果不抄了。可以自己做。

$B(\frac{t}{B_0}, \frac{M}{B_0}) = 1$ 。普适性。

什么是普适性？就是不同的体系下，约化磁化率  $\frac{t}{B_0}$ ，约化磁化强度  $\frac{M}{B_0}$  的差子大致相同。

6.4 序理论。

仿照点阵最重要特征关联长度  $\xi \rightarrow \infty$ ，此时，体系不再是有有限长度有测量而得到的观测结果，这个结果变化；所谓序理论下的不变性。

具体的推导弄不懂，这里只说明下 Ising 模型。

讨论晶格磁性时， $H = -J \sum_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = -J \sum_{ij} (s_i^x s_j^x + \dots + s_i^z s_j^z)$

只考虑 z 向的分量，即  $H = -J \sum_{ij} s_i^z s_j^z$ 。此时只需考虑  $\vec{s}$  的旋性，在  $\pm 1$ 。内部作用

最终的  $H = -J \sum_{ij} s_i s_j - h \sum_i s_i$  外场

6.5 重整化群方法。

定义：体系的配分函数  $Z(R, N) = \sum_{\{s_i\}} \exp[-H(R, \{s_i\}, N)]$ ，格点数的尺度为  $s$  倍， $a \rightarrow sa$ ， $s > 1$ 。

$\sigma_i \rightarrow \sigma'_i$ ， $i=1 \sim N$ ， $I=1, \dots, \frac{N}{s}$  的谓集函数。

此时  $H'(I, \sigma) = R_s H(I, \sigma)$ ， $R_s$  称为重整化变换，即  $R' = R_s(R)$ ， $R_s$  被称作重整化变换。以上过程也就是八个字：粗粒平均，重新标度。

仿照不动点： $R'_s = R_s(R'_s)$  相序平衡。得到的特征子程不变性。

这野程下一堆 Ising 模型的重整化群计算。

$$H = \text{const.} + \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad \sigma_i = \pm 1$$

$$\text{配分 } Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left[\frac{J}{k_B T} \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j\right]$$

$$\text{令 } K = \frac{J}{k_B T} \text{。分别对奇偶求和。}$$

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \dots \left\{ \exp[K(\sigma_1 + \sigma_2)] + \exp[-K(\sigma_1 + \sigma_2)] \right\} \cdot \left\{ \exp[K(\sigma_3 + \sigma_4)] + \exp[-K(\sigma_3 + \sigma_4)] \right\}$$

将  $\sigma_1, \sigma_3, \sigma_5$  重新标度为： $\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3$  有： $\exp[K(\sigma_1 + \sigma_2)] + \exp[-K(\sigma_1 + \sigma_2)]$

$$\equiv \left\{ \exp[K(\sigma_1 + \sigma_2)] + \exp[-K(\sigma_1 + \sigma_2)] \right\} = \phi(k) \exp[K'(\sigma_1 \sigma_2)]$$

$$\sigma'_i \sigma'_j \text{ 组合形式: } \{++\} \{--\} \{+-\} \{-+\}$$

$$\Rightarrow \phi(k) = 2 \cosh^2(k) \quad \text{得到 } K' \text{ 与 } K \text{ 的关}$$

$$K' = \frac{1}{2} \ln \left[ \cosh(2K) \right] \quad \text{关系。}$$

$$Z[K, \{s\}, N] = [\phi(k)]^{\frac{N}{s}} \sum_{\{\sigma\}} \exp[K' \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j] = [\phi(k)]^{N/s} Z[K', \{s\}, \frac{N}{s}]$$

$k \rightarrow k'$  不变的条件： $k=0$  或  $k=\infty$ 。  
 $H$  前对应  $T_c = \infty$  或  $0$ 。不可说。

6.6 元激发（准粒子）

定义：相互作用的粒子体系的能量激发态，可以看成是一组独立的基本波激发元集合，它们具有确定的能量，有时有确定的动量。实验中可观测到。eg：声子

复杂多体系统简化成接近于理想气体准粒子系统，为走了很多处理上的麻烦。

分为集体激发，个别激发。（前 Bose (或 Fermi) ion-ion 相互作用引发的晶格振动。phonon

磁性材料中的自旋-自旋相互作用引起的自旋波 - magnon

metal 中电子相互作用引起的等离子体集体振荡 - plasmon

光子与光学模耦合 - polariton  
 原子的电子，准电子 quasi-electron

电子或空穴在运动时带着周围初始的一起运动形成集体化子。

半导体中的电子-空穴对

0 声子 描述固体的周期性条件下的格点的大振动的集合，有确定的能量与动量。具体描述：  
 $T=0K$ ，格点原子无振动。基态  $T=0K$ ，原子在平衡位置附近振动。这是简谐的

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} (p_i^2 + m \omega_i^2 x_i^2) \quad p_i, x_i \text{ 笛卡尔坐标}$$

正则变换， $\tilde{x}_i + m \omega_i^2 \tilde{c}_i = 0$ 。

$$v_i = 1, \dots, 3N \quad \text{量子化, } \hat{p}_i = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \text{ 动量算符}$$

$$E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_i = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_i$$

有  $(n+1)$  个第  $i$  个格点，波矢为  $i$  的声子。

声子且。其量子化描述简谐振动量子态之间的跃迁。

二次量子理论部分总结，考虑简谐。  
 $\bar{n}_i(\omega) = 1 / (e^{\hbar \omega_i / k_B T} - 1)$ 。Bose 统计

四第量子激发与准电子。

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e_i^+ e_j^+}{|R_i - R_j|} + H_T$$

自由电子 相互作用项 原子间电荷

$$m \ddot{x} = -eE = -\frac{ne^2 x}{\epsilon_0}$$

即： $\ddot{x} + \omega_p^2 x = 0$ ， $\omega_p = (\frac{ne^2}{m\epsilon_0})^{1/2}$   
 对声子相对于正电荷集体振荡，电子集体振荡



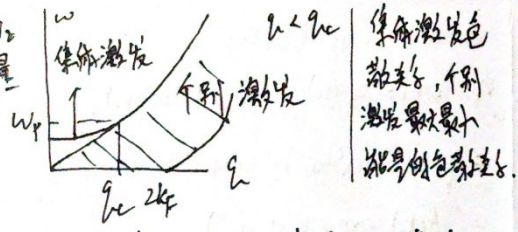
半导体中,  $n = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ , 计算得  $\omega \sim 10^{14} \text{ s}^{-1}$   
 $\epsilon = \epsilon_0 \omega_p^2 \approx 10 \text{ eV}$ , 远大于光子(可见光)能量  
 而对于二次电子气,  $\omega_p(\omega) = \frac{ne^2}{2m\epsilon_0} \frac{1}{\omega^2}$   
 (这公式怎么来的, 不明), 波长  $\lambda \rightarrow 0$  时  
 $\omega$  会比较大, 从而更容易激发。  
 实际中, 高速电子有速度选择特性, 光子在  
 薄层处反射。模拟“二次电子”

在外场  $\phi_{ext}(r)$  作用下, 均匀分布的自由  
 电子发生相应运动, 使得一部分电子的能量  
 高于 Fermi 能级, 这部分电子也促进了剩  
 下的电子可以看作被屏蔽的电荷层与准电子。  
 $\phi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Q}{r} e^{-kr}$

有人认为 (Lohm-Pines), 存在禁带时展  
 开的长波部分表现为等离体集体振荡用于  
 产生等离子激元, 剩下的短波部分为短程  
 的屏蔽效应。

个别电子-空穴对激发。  
 从空穴的角度看该问题。想象球内空穴上  
 拿出电子放到球外空穴空穴上, 金属  
 的空穴上产生了一个正电荷与空穴  
 $\epsilon$  激发能量对应的值。

$\epsilon < 2k_F$  :  $\hbar\omega_{kp}^{max} = \frac{\hbar^2}{2m} (q^2 + 2k_F q)$   
 $\hbar\omega_{kp}^{min} = 0$   
 $\epsilon > 2k_F$  :  $max: q^2 + 2k_F q$   
 $min: q^2 - 2k_F q$



$q < q_c$ : 集体激发  $>$  e-h 最大。= 看不到光子。  
 $q > q_c$ : 集体激发后可促进 e-h, 从而显著  
 减弱。

① Lindhard 方程。  

$$\epsilon(q, \omega) = 1 + \phi(q) \sum_k N_k (1 - N_{k+q}) \left\{ \frac{1}{\hbar\omega_k - \hbar\omega + i\eta} + \frac{1}{\hbar\omega_{k+q} + \hbar\omega + i\eta} \right\}$$

$$\hbar\omega_k \equiv E_{kq} - E_k, E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \phi(q) = \frac{e^2}{\epsilon_0 q}$$

$$N_k \text{ 为 } T=0 \text{ K 时, 无相互作用电子气的 Fermi 分布。} \eta \text{ 为虚数, } \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\omega \pm i\eta} = \frac{1}{\omega} \pm i\pi \delta(\omega)$$
 注:

只关注实部, 有:  $\epsilon_1(q, \omega) = 1 + \frac{1}{\epsilon_0} \phi(q) \sum_k N_k \frac{2\omega_k}{\omega^2 - \omega_k^2}$

静电屏蔽下:  $\omega$   
 $\epsilon_1 = \epsilon_1(q, 0) = \dots$  过于复杂。

以上均无解。  
 泊川原展液 Coulomb 作用:  
 $\lambda^2 = 3e^2 N / 2\epsilon_0 E_F = 3r_s^2$   
 $\phi(r) = \frac{(2\pi)^{-3/2}}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-\lambda r}$

\* Kohn 异常: 涉及晶体中杂质与准自由电  
 子的相互作用时, 不仅考虑长波近似下的  
 自由电荷表示, 利用严格的表示。

$\epsilon_1(q, 0) = 1 + \frac{1}{\epsilon_0} S(q, 2k_F)$

$$S(\omega) = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{1-x}{2x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \right]$$
 $q = 2k_F$  时,  $S(\omega)$  不在  $\omega \rightarrow 0$   
 从而介电常数在此处有奇点。电子谱中表  
 现为电子谱之变化。

这部分看不明白。  
 \* Friedal 振荡: 金属中存在某种带电荷  
 的杂质处于问题计算原则上, 杂  
 质电荷受电子屏蔽后于金属中存在禁  
 $\phi(r) \propto \cos(2k_F r) / r^3$

振荡之衰减

② 极化子  
 一个在离子晶体中缓慢运动的电子与正电  
 荷离子之间相互作用, 使其周围晶格  
 极化, 形成围绕电子的极化场, 这个场  
 会反过来作用于电子。

电子场 = 准极化子  
 eg: 电子空穴对? 影响到晶格的 -  
 离子晶体中的载流子均为极化子。  
 其次, 晶格变形区域的大小。

慢电子与光学横纵光子 (LO) 相互作用。  
 发射或吸收一个 LO 光子, 能量上不守恒  
 性产生。  $\Delta E = \frac{1}{\Delta k} \left( \frac{\hbar}{2m^* \omega_{LO}} \right)^2$   
 $m^*$ : 多数离子晶体,  $m^*$  与自由电子质量  
 相差。极化子  $\sim 10A$  极化半导体的中,  
 $m^*$  是自由电子的百分之几, 大极化子  $\sim 100A$   
 处理极化子部分放弃。

④ 表面等离子激元  
 金属、纳米结构中自由电子共振振荡

a. LSP: 局域表面等离子激元  
 在  $\omega > \omega_{pl}^{max}$ , 高频区, 短波长,  
 表面等离子激元的色散关系为:

$$\omega = \sqrt{\omega_p^2 + c^2 k^2} \text{ for bulk plasmons}$$
 而对于尺寸小于对应波长的球形粒子, 可以  
 看作大半径的极化率  $\epsilon$  不变, 在这个  
 模型近似下, 当半径在合适时达到共  
 振, 激发系数可以空壳好几个数量级,  
 将入射光增强。

b. SPP 表面等离子激元  
 金属、2 材料  $\rightarrow$  总会存在特定波  
 长的光可以“沿着  
 表面往前跑”。

PPT 看不懂。  
 SPP 的要求的条件, 看不明白。

光波矢与 SPP 匹配:  $\omega_{SPP} = \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}} k_0$   
 激发技术: 全反射镜。  
 $k_x$  扫描或衰减了,  $k_x = n_p k_0 \sin \theta$ 。  
 调整日角使与  $k_x$  匹配。  
 光栅:  $k_x = k_0 \sin \theta \pm \frac{2\pi}{\Lambda}$  周期。  
 调整周期以匹配。

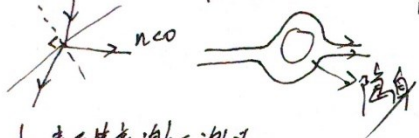
c. 等离子激元光子学  
 operating speed of data in Plasmon

IT 强耦合共振  
 电路: LC 振荡电路, 数据输  
 出比限制速度。  
 光子: 咋传输? 散射限制。

d. 透射 up. 看不懂。

e. 光折射率材料 and 隐身斗篷.

介电常数与磁导率同时为负, 折射率负.



f. 表面等离子激元激光

发光增强介质/金属纳米颗粒. 结构中, 表面等离子元放大效应.

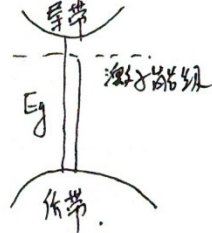
g. 表面增强拉曼.

分子吸附于金属表面, 发生电荷转移, 分子有效极化率增强;

搞半天还是无法理解表面等离子激元共振.

⑨. 激子.

光激发的能量没有到  $E_g$  时, 不形成独立的  $e-h$  对, 而是  $e-h$  会耦合形成束缚态.



如固体化学中遇到过的包心.

光催化电解水.  $H_2O \xrightarrow{h\nu} H_2 + \frac{1}{2}O_2$ .

凝聚态物理的范式还没完.

6.7 1+1 维度与缺陷.

有序介质处在更高的激发态, 可产生非弹性激波, 拓扑形缺陷,  $\Rightarrow$  局域化的, 序参量奇异点, 1+1 维度.

定义: 有序相 (对称破缺) 体系在能量取相干的情况下对外界某种响应, 反应了有序相中长时间上粒子间存在关联.

g: 刚性转动. 晶格从一端传到另一端

拓扑性的. 不可能渐变, 而是跳跃能量的跃变.

6.8 层观性质

在什么层次, 物质有其相应的对称规律, 或者说, "物质", 不仅仅包括实体, 虚拟的精神文明也是 "物质" 之一.

1+1 维度是高层次的性质, 但至纳米团簇团观又相应的描述.

To know the whole world.

6.9. 超导电性

前后100年, 叫叫叫超果当时, 叫温温叫叫.

超果的载流态是一种1+1 维度性质. 不可能处于基态. 典型特征:

完全的排斥磁性 & 电阻无零大.

BCS 理论: 库珀对,  $k, -k$  两工隙态的电子, 整体的纠缠在一起, 形成拓扑的结构.

6.10. 凝聚态物理的一些 TIPS.

1+1 维度的破缺  $\rightarrow$  拓扑缺陷的产生.

缺陷结构: 比元激发更高阶的激发态. 序参量空间: 序参量的非不变量导致了 1+1 维度.

缺陷结构与对称破缺相的关系: 拓扑理论.

一维序参量容许面缺陷. 二维序参量容许线缺陷. 三维序参量容许点缺陷.

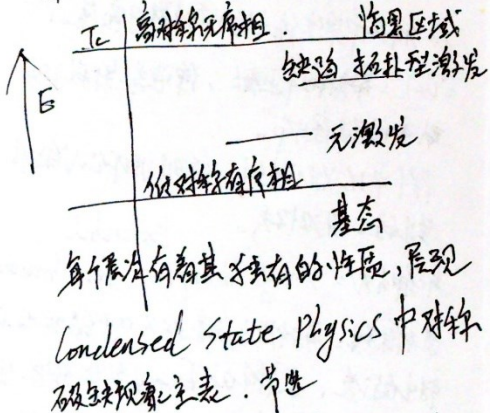
6.11 拓扑缺陷的表征.

拓扑映射: 整体的结构, 不存在局部的缺陷, 拓扑上相似.

6.12 凝聚态物理的范式

核心概念: 对称破缺

叫叫叫, 相互关联: 基态/元激发/缺陷/边界区域



铁电 空间反演 非粗粗 量子铁电带畴界 铁磁 时间反演 ... .. 铁磁畴带畴界

超导 规范不变性 玻色子 超导体 超导体 涡旋 晶体 平移 泡子 1+1 维度 表面缺陷.

液晶 旋转 元波 取向波 取向弹性 ... .. 现象 对称性 高对称 低对称 元激发 1+1 维度 缺陷.

很多种看上去毫无关联的现象, 可以用凝聚态物理产生统一的范式来表述.

7. 多铁

空间反演的铁电与时间反演的铁磁 ordering of spin vs polar arrangement of charges.

合二为一.

存在的问题: 磁电耦合程度低.

一层铁电/一层铁磁: 器件化困难.

但由于其相其他优越的存取性质, 关键于其不断.

具体可以看南大发表的报道等化.

编到此书来. 内容量非常大, 有很多推导复杂的, 理解起来是升的相态, 直接跳过了.

# Chapter 2 Disorder

## 1. 无序系统

1.1 what is 无序: 体系的性质不能以长程有序的理想晶体作为参照也似, 无序作办供托来解释的情况。

这个有点怪。用物理学理论处理时遇到的问题来定义, 有点怪。

1.2 类型. 相对于完美的晶态, 成为无序 (固溶体) 位置无序 (位错) 拓扑无序 (拓扑绝缘体)

无序是相对的存在, 或者说绝对的存在。

1.3 形成. 定义原子/分子的弛豫时间。体系中原子/分子进行结构构造重新排列的时间。系统从液态的  $T_L$  变化到固体的  $T_S$  的时间如果远大于  $\tau$  的话, 原子将无法到达平衡位置。  $\Rightarrow$  无序非晶态。

液态无序相保留到了固态有序相中。

1.4 制备 核心: 物质在冷却过程中如何 avoid 转变成晶体而形成非晶体  
液相急冷; 气相汽沉积; 激光加热; 离子注入法。

1.5 非晶态固体结构的描述与检测。

原子径向分布函数 RDF, 描述原子分布状态. 作为模型, 一种原子构成的非晶态固体  $J(r) = 4\pi r^2 \rho(r)$ , 表示  $r \rightarrow r+dr$  球壳内的平均原子数。

若是理想晶体,  $J(r) = \sum_i Z_i(r) \delta(r-r_i)$

$Z_i$ : 第  $i$  层原子数  $r_i$ : 位置。

而原子的热运动是零点运动  $\rightarrow$  峰展宽

无序程度升高, 峰宽越来越大。

RDF 可以从衍射结果由 Fourier 变换得到, 公式如下:

$$J(r) = 4\pi r^2 \rho + \frac{2\pi}{r} \int_0^\infty k [I(k)-1] \sin(kr) dk$$

$$k = \frac{2\pi}{a} = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta \quad (\text{衍射条件})$$

$\rho$ : 样品中单位体积的平均原子密度。

$I(k)$ : 散射强度, 弹性散射粒子的强度的强度分布。

PPT 中以 XRD 为例, 说明 RDF 公式的推导过程。自测不看。

另一种方式: X-ray Absorption Fine Structure  
基本原理: 每个原子/离子对 X-ray 的吸收有特征性的谱, 在特征 X-ray 处出现吸收边, 在吸收边高吸收后, 吸收系数随着 E 振荡变化。

"叫作原子周围存在其它原子, 其所射出的光电子被邻近原子散射形成散射干涉"  $\leftrightarrow$  吸收边结构

定义 EXAFS 谱函数:

$$\chi(k) = \frac{\mu(k) - \mu_0}{\mu_0}$$

$\mu(k)$ : 实际吸收  
 $\mu_0$ : 无原子散射  
这里直接给出  $k, L(\omega)$   $\mu_0$  自由原子。

吸收谱函数:

$$\chi(k) = \sum_j \frac{N_j F_j(k)}{k^2} e^{-2r_j/\lambda} e^{-2k\sigma_j^2} \sin(2kr_j + 2\phi_j(k))$$

$\chi(k) = \mu(k) \exp(-k\sigma^2)$   
 $\chi(k) \propto \exp(-|k-r_0|^2)$

过复杂, 几项解释, 感觉不会考。

$j$ : 两体层序号  $r_j$ : 第  $j$  层半径  $N_j$ : 原子数

$F_j(k)$ : 第  $j$  层内每个原子的散射振幅中项。

$k = 2\pi/\lambda$   $e^{-2r_j/\lambda}$ : 非弹性散射衰减。

$\lambda$  为光电子的波长。

$e^{-2k\sigma_j^2}$ : 展宽的, 原子热运动位置引起的衰减。

$\phi_j(k)$ : 相位。

利用这个公式, 根据 EXAFS 数据可以推算出无序体系的结构, 也是用 DF 公式。

1.6 非晶态固体的结构模型与实验。

a. 刚球无规密堆 (metal or hybrid metal)

局域短程序多面体堆积在一块儿。

b. 连续无规网络模型 (共价结合非晶固)

原子配位与晶态相似 or 相同, 远一点就不行了。

石英的硅网络。规则 vs 无序。

c. 有机玻璃. Random Coil Model

随机缠绕。

d. 非晶半导体. 悬挂键. 缺陷. 杂质

2. 无序系统的电子态。

2.1 扩展态与局域态。

All electrons 在有序晶格作公有化运动  $\rightarrow$  扩展态。若以杂质, 形成缺陷, 缺陷捕获电子, 即局域态。

Anderson 局域化:

定义: 热力学极限下的体系 ( $N \rightarrow \infty$ ), 从有限  $t=0$  时一格点有  $n$  个电子, 随着时间  $t$  在格点扩散到电子的概率振幅  $A_{ij}(t) = 0 \rightarrow$  扩展

局域  $A_{ij}(t) \rightarrow$  局域态。

## 2.2. Anderson 无序模型。

首先讲出 TBA 处理有序系统:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)$$

厄米尔函数  $a(r^2 - \epsilon)$  为量,  $i$  为格点

二次量子化  $\psi$ .

$$H = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\sigma} V_{ij} c_i^\dagger c_j c_i^\dagger c_j$$

固有项 重叠项

$$\epsilon_i = H_{ii} \quad V_{ij} = H_{ij}$$

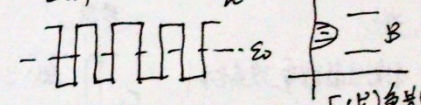
有序系统中,  $\epsilon_i$  与  $i$  无关,  $V_{ij} = V$  如此

$$H = \epsilon_0 \sum_i c_i^\dagger c_i + V \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j c_i^\dagger c_j$$

对角化 =  $\sum_k E(k) c_k^\dagger c_k$

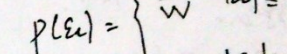
$$E(k) = \epsilon_0 + V \sum_{\langle ij \rangle} e^{ik \cdot (r_j - r_i)}$$

有序晶格, 有序能带。



Anderson 认为:  $\epsilon_i$  随格点  $i$  随机变化,  $V$  不变。

$$P(\epsilon_i) = \begin{cases} \frac{1}{W} & |\epsilon_i| \leq \frac{W}{2} \\ 0 & |\epsilon_i| > \frac{W}{2} \end{cases}$$



在能量  $-\frac{W}{2} \sim \frac{W}{2}$  范围内,  $\epsilon_i$  连续变化并且相互不相关。W 表征无序程度,  $V$  不变表示系统短程有序。

Anderson 局域化:

定义: 热力学极限下的体系 ( $N \rightarrow \infty$ ), 从有限  $t=0$  时一格点有  $n$  个电子, 随着时间  $t$  在格点扩散到电子的概率振幅  $A_{ij}(t) = 0 \rightarrow$  扩展

局域  $A_{ij}(t) \rightarrow$  局域态。

a. 定性说明.

强无序.  $W/V \gg 1$

考虑电子在格点1, 使得邻近格点1上的电子波函数混入, 量子力学微扰论.

$$\psi_k = \psi_k^0 + \sum_n \frac{H_{nk}}{E_k - E_n} \psi_n^0$$

$\sum_{E_i \in Z} \frac{V}{E_i - E_c}$ , 设 $E_i$ 为子带边,  $E_i$ 均分布在  $W/2$  个间隔内.  $\frac{V}{E_i - E_c}$  导致  $\frac{2zV}{W}$

$\frac{2zV}{W} < 1$ . 收敛定域  $> 1$  扩展.

2. 推迟格林函数.

$$G(r, t; r', t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \langle [A(r, t), B(r', t')] \rangle$$

是格林函数.  $\langle [A(t), B(t')] \rangle$  是对易平均值

$$\langle \dots \rangle \text{ 统计平均.}$$

$$\langle A \rangle = \text{Tr} [e^{-H/k_B T} A] / \text{Tr} [e^{-H/k_B T}]$$

其物理意义是:  $t$ 时刻在  $r$  初始位置的粒子, 经过  $t' - t$  时间后出现在  $r'$  位置的几率.

$$G(r, t; r', t') = G(r, t-t', 0) = G(r, t)$$

$$G(r, t; t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t-t') \langle [A(r, t), B(r', t')] \rangle$$

$$\text{微扰理: } \langle SA \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} \frac{2 \text{Im} G(\omega)}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} d\omega$$

计算平均值.

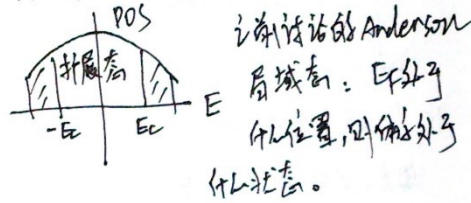
算  $A, B \rightarrow$  求  $\langle A|B \rangle \omega \rightarrow$  建立  $\langle A|B \rangle \omega$

微扰论  $\rightarrow$  求运动方程的解  $\rightarrow$  微扰理

2.4 Anderson 局域化模型的严格推导.  
放弃.

2.5 Mott 模型.

谱的讨论中, 若  $\delta > \delta_c$ , 则仅存体系中的所有本征态为局域态; 若  $\delta < \delta_c$ , 则既存扩展态, 也存在局域态.



谱讨论的 Anderson 局域态:  $E_f$  处于什么位置, 则体系处于什么状态.

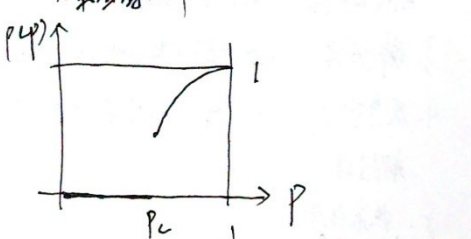
2.6 渗流理论.

what is 渗流? 流体在随机网络中运动. 自然界中石油与水, 体内部的器官中的血液. 渗流阈值: 围棋棋局棋棋子占位.

每个格点被占据的几率是  $p$ . 不被占据的几率是  $1-p$ .  $p$  个集团变大, 达到一个临界点时, 网络上会出现无限大集团  $\rightarrow$  渗流相变.

渗流相变. 序参量: 渗流几率.  $\langle p \rangle$

占据几率为  $p$  时, 实际上任意格点属于无限大集团的几率.



两点间的相关函数  $G(x)$   
当原点被占据时, 既原点为  $x$  的格点

也属于同一集团的点占几率.

eg: 一维.  $x=0, G(x)=1. x=1, G(x)=p$

$$x=x, G(x)=p^x = e^{x \ln p} = e^{-\frac{x}{\nu}}$$

$$\nu = -\frac{1}{\ln p}, p > 1 \text{ 时}$$

$$\nu = \frac{1}{1-p}, p > 1, \nu \rightarrow \infty$$

$$高维: G(x) = \begin{cases} e^{-x/\nu} & p < p_c \\ (\frac{1}{x})^{d-2\nu} & p > p_c \end{cases}$$

$$\nu \propto \frac{1}{|p - p_c|^\nu}$$

$d=2, \nu = \frac{4}{3}, d=3, \nu = 0.88$   
计算过程非常复杂.

按照  $p$  划分渗流集团:

$p < p_c$ :  $\nu$  有限, 逐次独立相似  
 $p = p_c$ : 初始无限大集团出现, 自相似  
 $p > p_c$ : 出现大量无限大集团, 只有有限

what is 自相似?

不管对结构作怎样的放大与缩小, 结构看上去是相仿的.

结构向上去是相仿的.

英国海岸线周长  $\rightarrow$  分形问题.

let  $k$  be the scale factor

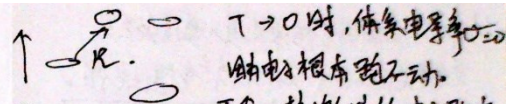
let  $N$  be the number of copies of the original that you get.

$$D = \log_k N$$

3. 无序体系的直流电导.

3.1 跳跃电导.

电子处于强定域区, 电子处于定域态, 相邻定域态十分不同.



$T \rightarrow 0$  时, 体系电导  $\sigma = 0$ . 电子根本不动.  $T \uparrow$ , 热激发的电子跳去, 产生 hopping conductivity, 电子两个因素: ① 两个波函数的交叠. ② 相邻格点的能量差.

$$P \propto \exp(-2\eta/\xi - \frac{\Delta E}{kT})$$

低温下电导, 变程跳跃  
高温下电导, 定程跳跃.

3.2 非晶半导体的直流电导.

无序体系的半导体的电导性质

非晶半导体存在扩展态、定域态(带尾)、带隙中的缺陷定域态, 无序体系中的载流子都可与对电导有贡献.

这类体系的载流子输运通常是"钉扎"在带隙中, 不因掺杂而变化, 不因温度而改变.

大分解  $\rightarrow$  项.

$$\sigma = \sigma_0 e^{-E_A/kT} + \sigma_1 e^{-E_1/kT} + \sigma_2 e^{-E_2/kT}$$

第一项: 带隙中缺陷定域态  $\rightarrow$  带带扩展态.

$$E_1 - E_f = E.$$

第二项:  $\dots \rightarrow$  带尾定域态.

$$E_1 = E_A - E_f + W_1, W_1 \text{ 带带尾间跳跃平均激活能.}$$

第三项:  $\dots \rightarrow$  带隙中缺陷定域态.

$$E_2 = W_2, W_2 \text{ 缺陷定域态的跳跃平均激活能.}$$

$E_2$  最小,  $E_1$  中间,  $E_2$  最大.

3.3 非晶态金属的电阻率及其与温度的关系  
 柔性的核心在于无定结构本身提供电阻。

- 1) 非晶(非晶态金属)  $\rho > \text{metal}$ .  
 $T \rightarrow 0$  时, metal 的  $\rho \rightarrow 0$ , 而非晶存在剩电阻。
- 2) 非晶的电阻率温度系数  $\alpha = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT}$ , 非晶比无定相提供的电阻更随温度涨落。
- 3) 可以存在温度系数。  
 电子在  $T \uparrow$ , 无定态之间电子 hopping
- 4) 非晶在晶化温度, 晶化后电阻率突变。

### 3.4 定域化理论

虽然 岩岩力学强懂, 但真的没兴趣。  
 核心, 无定尺寸随着电子函数的变化形式。

系统观,  $\langle L \rangle = \sigma L^d$ , 改变系统长度  
 注  $\langle L \rangle = f(\langle L \rangle, L/L)$ , 只是着值函数

数(与什么材料、什么离子、什么形状无关)  
 $\beta(L) = d \ln \langle L \rangle / d \ln L$ .

金属良导体:  $\beta(L) = d-2$ , 然后

无定强导体:  $\beta(L) \approx \ln L$

根据也 = 电阻体  $\beta(L)$   $\sim \ln L$  正好形式。

也 最后的结论如下:

$$\sigma(L) = \sigma_0 - C \left[ \frac{1}{L_0} - \frac{1}{L} \right] d=1$$

$$\sigma(L) = \sigma_0 - C \ln(L/L_0) \quad d=2$$

$$\sigma(L) = \sigma_0 - CL \quad d=1$$

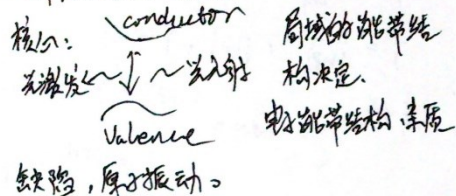
$\sigma(L)$  的依赖,  $L < \xi$  区的  $\sigma(L)$  总是非晶的  
 非晶化: 弱局域化。

弱局域化: 弹性散射平均自由程  $l$  远小于  $\xi$

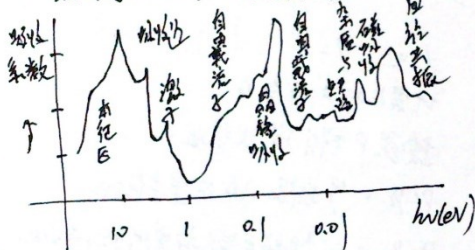
非弹性散射自由程  $l_i$  的无定扩散。

$l \ll l_i < L < \xi$   
 这个概念中的两个散射自由程无法理解。

4. 无定系统的光学性质



4.1 晶体的光吸收与光散射过程

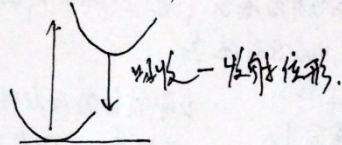


- ① 本征: 价电子  $\rightarrow$  导带。
- ② 激子: 电子-空穴束缚态
- ③ 自由载流子: 电子-空穴同带跃迁
- ④ 晶格吸收: 长光学横波声子与红外光子耦合。
- ⑤ 杂质吸收: 杂质能级  $\rightarrow$  自由载流子
- ⑥ 磁-声子共振:  $\sim \text{IR}$ , 自旋共振。

4.2 非晶态金属的光吸收与光致发光

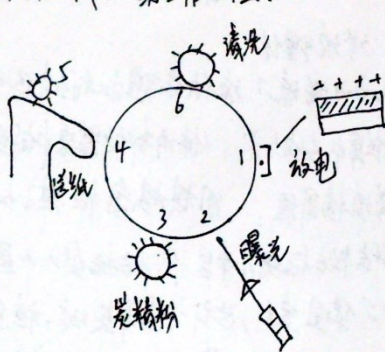
- ① 本征吸收: 无选择定则, 吸收高, 得查了展宽的 DOS.
- ② 吸收边附近: 高价带扩展  $\rightarrow$  导带扩展, 缺陷区: 价带扩展  $\rightarrow$  带尾定域态。弱: 窄带尾的自共振。
- ③ 原子振动与光相互作用准动量守恒的限制, 阻止声子振动模均有向上。

④ 电子-声子相互作用, 使定域态上的电子  
 分子态和声子激发态时, 原子平衡位置不同。  
 发射光子的频率比吸收光子。  
 (Raman 光谱)



⑤ 5. 无定系统的应用

激光打印机的的工作过程。



1. 硒鼓带电 感光鼓表面带电荷, 光导层在光照时电阻率下降。
2. 扫描曝光 受光照区域的电阻率下降, 形成静电荷分布构成的潜像
3. 静电成像 碳粉与静电荷作用, 吸附成像
4. 着色转印. 打印纸/感光体转动, 碳粉转印。
5. 热定影。
6. 清洗硒鼓。

# 第三章 尺寸

## 1. 介观体系概念

电子与静态散射中心为弹性散射，散射前后相位的确定关系称为相位记忆，电子与动态散射中心的散射为非弹性散射，相继两次之间所走的距离为  $L_\phi = (D/\tau)^{1/2}$ ，

其中  $\tau_\phi$  是非弹性散射的弛豫时间， $D = V_F l / 3$  扩散系数， $l$  为弹性散射的平均自由程，我们把尺度相当于或小于  $L_\phi$  的小尺度体系为介观体系

费米波长  $\lambda_F$ ：它能够刻画粒子的量子涨落。当系统的尺度接近费米波长时，粒子的量子涨落非常强；而当尺度远大于费米波长时，粒子的量子涨落相对较弱。

平均自由程  $l$ ：占据初始动量本征态的粒子被散射到其他动量本征态前，粒子所走过的平均距离。

退相干长度  $L_\phi$ ：占据某一个本征态的粒子，在完全失去相位相干性之前所传播的平均距离。

局域化长度  $\xi$ ：描述体系无序程度的量。

$\lambda_F \ll l \ll L_\phi \ll L \ll \xi$  扩展区经典电导

$\lambda_F \ll l \ll L \ll L_\phi \ll \xi$  量子涨落区，普适电导涨落

$\lambda_F \ll L \ll l \ll L_\phi \ll \xi$  弹道区，体系性质由边界决定

$\lambda_F \ll l_\phi \ll \xi \ll L \ll L$  量子局域化区，无序区

## 2. 剩余电阻

金属的电导率  $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m^*}$ ，其中  $m^*$  是载流子的有效质量（反应了周期性下的声子性质） $n$  是载流子浓度  $\tau$  是输运弛豫时间  $\rightarrow$  处于某动量本征态的载流子的平均寿命

输运弛豫时间包含了各种相互作用的贡献：电子杂质，电子声子，电子电子

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{e-imp}} + \frac{1}{\tau_{e-ph}} + \frac{1}{\tau_{e-e}} + \dots = \frac{1}{\tau_0} + \frac{1}{\tau_\phi}$$

$\tau_0$  表示电子与静态散射中心的散射，弹性的

$\tau_\phi$  表示电子与非静态散射中心的散射，非弹性

较纯金属：杂质散射贡献较小，电子-电子相互作用由于传导电子的屏蔽效应而变得很弱。在温度较高时，声子散射起主要作用，它决定了电导率随温度变化的规律。随温度的降低，声子浓度不断减少，而杂质的数量不变，因此电导将趋于常数（剩余电阻）。

这里将电子看做粒子，其作为波的运动特征相位被忽略掉。忽略的理由在于，电子沿着不同布朗路径从 X 到达 Y 点，由于路径的无规性质使得电子的干涉效应项统计平均为零。若体系电子运动路径并非无规，则干涉效应不为零，如散射路径有限，电子分波具有时间反演对称性。

## 3. 弱定域化的物理图像

虽然巨大数量的电子扩散路径的电子分波的干涉趋向于相互抵消，但经过时间反演路径的电子波的干涉却相互增强。电子回到途中某一点几率的增加，意味着观察点 N 发现电子的几率下降，导致电导率的减小或电阻率的增加，呈现对经典电导率的量子力学改正。

什么叫做时间反演对称性？

两个波矢相反的电子，沿着一条闭合的路径按照相反的方向运动到起点再碰头（好基友一辈子）。

这个效应带来的影响是什么？

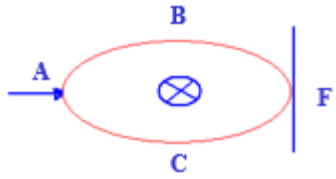
具体的推导过程从略。结果是，

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*} \left[ 1 - \frac{1}{\pi k_F l} \ln \frac{\tau_\phi}{\tau_0} \right] = \sigma_0 - \sigma_{00} \ln \frac{\tau_\phi}{\tau_0} = \sigma_0 - \Delta\sigma$$

其中  $k_F$  是费米波矢  $l$  是平均自由程  $\tau_\phi$  是退相干时间  $\tau_0$  是散射间隔

修正项比主项小三个量级，其物理图像是，两个电子走闭合路径，并且是反着走的几率比自由散射低得多。修正项在电子平均自由程较小，也就是散射间隔较小的样品中比较大。

## 4. Aharonov-Bohm(AB)效应 简述



如上图所示,电子束分成两股,一股沿着 ABF 路径达到屏上,一股沿着 ACF 路径达到屏上.中间置入磁通.根据经典物理,电子束通路上木有磁场,没有磁力作用在电子上,螺线管中磁通不会产生任何影响.而根据量子力学,电子将感受到与磁通量相联系的矢量势的存在,电子波函数将附加一个与矢量势 A 相关,依赖于路径的相位.

$$ABF: \Psi_1 = \Psi_1^0 \exp(i2\pi \int_1^{\dots} \dots) \quad \Phi_0 = \frac{hc}{e} \text{ 量子磁通}$$

$$ACF: \Psi_2 = \Psi_2^0 \exp(i2\pi \int_1^{\dots} \dots)$$

在 F 点干涉

$$ABF: \Psi_1 = \Psi_1^0 \exp(i2\pi \int_1^{\dots} \dots) \quad \Phi_0 = \frac{hc}{e} \text{ 量子磁通}$$

$$ACF: \Psi_2 = \Psi_2^0 \exp(i2\pi \int_2^{\dots} \dots)$$

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$$

$$\text{设 } \Psi_1^0 = \Psi_2^0 = \Psi_0^2$$

$$|\Psi^2| = 2|\Psi_0|^2 + 2|\Psi_0|^2 \cos \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}, \Phi = 0$$

干涉强度依赖于两条路径封闭的磁通量,并以量子磁通为周期震荡.

如何观察这个效应?电子束不受杂质散射,相位不受破坏->高真空或者超导体,媒介:理想的金属环.在这样的金属环中,若有磁通 Φ 穿过中空区,这个环的所有物理性质将随着 Φ 以 Φ<sub>0</sub> 作周期震荡.描述这个体系的电子波函数与能量本征值:

$$\Psi(x) \sim \exp(ikx)$$

$$k_n = \frac{2\pi}{L} (n + \frac{\Phi}{\Phi_0}), n = \text{int}$$

$$E_n(\Phi) = \frac{\hbar^2}{2m} \dots \Phi_0'$$

这个模型与周期为 L 的一维能带问题类似.(阎守胜,固体物理基础)

### 5. 介观体系的电导 (Landauer 公式) 简述

电导系数 g 是电导率的倒数.Landauer 提出,将两电极视为理想导体,被测器件视为一势垒,器件的电导系数 g 就一定依赖于电子波的穿透系数 T:

$$g = \frac{e^2}{h} \frac{T}{1-T} \quad T \rightarrow 1, g \rightarrow \infty$$

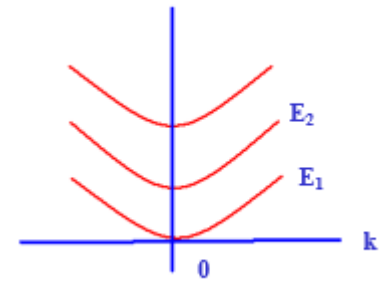
求 T 的过程极其复杂.下面讨论单通道无穷长理想导线中独立电子的电导.首先是这种体系的独立电子的薛定谔方程:

z 方向为传播方向,自由度为零.

$$\Psi(x, y, z) \sim \exp(ikz)\phi(x, y)$$

$$\text{本征值: } E = E_{x,y} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

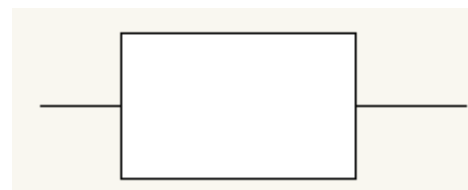
$$[\frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2) + V(x, y)]\phi(x, y) = E_{x,y}\phi(x, y)$$



其能带图如右图所示.每条曲线代表一个横向子能带,也就是容许通道,竖直方向上的分立来源于 z 方向的自由度.在每个通道中电子以行波方式传播,引起电荷流动.当 T=0K 时,导线上第 n 个通道上的入射电流 I<sub>n</sub> 为:

$$I_n = \frac{e}{h} \dots \text{其中 } \mu \text{ 为电子的势,与费米能级 } E_F \text{ 不一致,源自于电势的作用.}$$

被测器件视为一块不均匀散射媒质,它将理想导线 1 中入射而来的一束渐近行波散



射到导线 2 中的某些容许通道(透射波),及导线 1 中的某些容许通道(反射波)中.一般的导线宽度很窄,各个子能级之间的能差很大,最低子能带可以被占据,为唯一通道.设从 1 到 2 的透射几率与从 2 到 1 的透射

几率相等都是 T

$$\text{从 } 1 \rightarrow 2: I_1 = TI_{1n} = T \frac{e}{h} (\mu_1 - E_0)$$

$$\text{从 } 2 \rightarrow 1: I_2 = TI_{2n} = T \frac{e}{h} (\mu_2 - E_0)$$

$$\text{净电流: } I = I_1 - I_2 = T \frac{e}{h} (\mu_1 - \mu_2) = T \frac{e^2}{h} (V_1 - V_2)$$

$$g_c = \frac{I}{V_1 - V_2} = \frac{e^2}{h} T$$

与之前的  $g$  的关系:

$$g_c^{-1} = g^{-1} + \frac{h}{e^2} \text{ 其中 } g \text{ 是电子自洽屏蔽引起的势垒电阻,第二项为两端的接触电阻.}$$

$g_c$  是实际测量得到的电阻.

## 6. 普适电导涨落(UCF)

(1) 一般特征

a. 与时间无关的非周期涨落, 不是热噪声(和时间有关)。

b. 这种涨落是样品特有的(sample-specific), 涨落花样可重复(pattern)。

c. 涨落大小是  $e^2/h$  量级( $\sim 4 \times 10^{-5} S$ ), 普适量。与样品的材料、尺寸、无序程度无关, 与样品的形状和空间维度只有微弱的关系, 只要求样品具有介观尺度, 并处于金属

$$\text{区: } \lambda_F \ll l \ll L \ll L_\phi \ll \xi$$

即普适电导涨落的存在反映了介观体系和宏观体系本质上的差别

(2) 物理解释

从样品一边到另一边的透射几率幅是许多通过样品的费曼路径相应的几率幅之和。在金属区电子通过样品时经历多次与杂质的散射, 其费曼路径是无规行走式的准经典“轨道”, 不同的费曼路径之间的相位差是不规则的随机干涉效应(Stochastic interference), 使电导呈现非周期的不规则涨落。

(3) 简单推导

过程公式繁多复杂懒得打. 首先计算透射几率的涨落, 然后计算电导  $G$  的涨落. 在计算电导  $G$  的涨落的过程中, 利用反射率互不相干的假定而非透射率互不相干. 原因在于透射通道数目比反射通道数目多很多, 自然的存在的关联也就会很多, 从而忽略其关联是不正确的. 反射通道数目较少, 如此假设是可行的.

(4) 移动一个杂质所引起的电导涨落

牵一发而动全身.  $T=0K$  时, 使一个杂质移动距离  $\delta r > k_F^{-1}$ , 所带来的样品电导的涨落:

$$\delta r > k_F^{-1} \quad \sqrt{\langle (\delta G_1)^2 \rangle} \cong \begin{cases} \frac{e^2}{h}, d=1 \\ \frac{e^2}{h}, d=2 \\ \frac{e^2}{h} \left(\frac{l}{L}\right)^{\frac{1}{2}}, d=3 \end{cases}$$

对于一二维情形, 移动一个杂质的效果与移动全体杂质的效果相当. 一条典型的费曼路径所通过的杂质数在总杂质数中所占的百分比, 等价于通过特定杂质的费曼路径数在总费曼路径数所占百分比. 因此移动一个杂质相当于改变了所有费曼路径中百分比为  $f$  的费曼路径. 对于这段话不大理解.

## 7. 非定域效应(非局域性电导)

电子自由程接近或超过样品尺寸, 关联效应可遍及整个样品. 结构和结构, 元件和元件之间的距离大为缩短, 很难用单个分立元件的观点来进行分析, 必须考虑元件之间的相干性和合作效应。

例如对  $0.1 \mu m$  的结构上加上  $1V$  电压,  $E \sim 10^5 V/cm$ , 这个体系的导电机制不能用普通的线性理论描述, 必须考虑非线性效应.

## 8. 正常金属环中的持续电流(简述)

介观尺寸的一维非超导金属环中, 由于电子的平均散射自由程大于材料尺寸, 电子间关联强烈, 可以通过磁场诱导持续电流.

与之前 AB 效应的体系相同, 对于一维理想金属导体围成的环, 再往其中输入磁通. 能级表述与四中的相同:

$$E_n(\Phi) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \approx \frac{\hbar^2}{2mL^2} \dots \Phi_0'$$

由于体系的自由能  $F$  依赖于磁通, 从而环中存在的电流:



$$I(\Phi) = -\frac{\partial F(\Phi)}{\partial \Phi}$$

T=OK 时

$$I(\Phi) = -\sum_{E_n < E_F} \frac{\partial E_n(\Phi)}{\partial \Phi} = \sum_{E_n < E_F} I_n$$

环中电流存在时一种平衡态现象,只要磁通保持恒定,电流就不会衰减.由于相应于同一个磁通,相邻能带的  $\frac{\partial E_n(\Phi)}{\partial \Phi}$  大小相近,符号相反,相互抵消,求和式大致由费米能级附近的最后一项决定,其量级为:

$$I_0 \approx \frac{ev_F}{L} \text{ 对于一晶格常数为 } a=0.2\text{nm, 原子数为 } 10000 \text{ 的正常金属环, } I_0=10^{-7}\text{A.}$$

## 9. 纳米体系

### 1) 定义

体系的某个或者数个特征长度处在纳米量级

### 2) 结构单元

零维:团簇,量子点,纳米粒子

一维:纳米线,量子线,纳米管,纳米棒

二维:纳米带,二维电子气,超薄膜,多层膜,超晶格

### 3) 纳米结构的制备技术

a.球磨和机械合金化工艺

b.化学合成工艺

c.等离子电弧合成技术

d.电火花制备技术

e.激光合成技术

f.磁控溅射技术

g.生物学制备技术

h.燃烧合成

i.喷雾合成

李震宇主要介绍了些技术.

Photolithography:制作芯片,如现在 22nm 工艺的 CPU.保护位不受光刻蚀.

Thin film technology:制作石墨烯等薄层状物质.生长有三种模式:一层一层,落在哪里

就长哪里;前两种方式结合.要求厚度均匀,则用第一种;要求做催化剂,则用第二种.这类方法:热蒸发;溅射;化学气相沉积;激光消融;分子束外延;单分子层自组装.

One dimension nanowires:VLS 生长法.

Zero dimension nanoparticles:溶胶凝胶等.

Organic Nanoparticles:聚合物

### 4) 基本物理效应

#### (1)小尺寸效应

尺寸与吸收,激发波长;德布罗意波长以及相干长度相当的时候,导致声,光,电磁,热力学等物性与红光块材完全不同.具体有何不同具体分析.譬如随着纳米颗粒尺寸的减小,吸收光蓝移

#### (2)表面效应

表面原占总原子数比例随着尺寸减小变大,而表面原子由于键合缺失,其活性很高,很容易与其他物质发生化学反应.块材中表面原子数目相对来说忽略不计.

#### (3)量子尺寸效应

金属纳米粒子的能级间隔

$$n = N/V \text{ 不变 } E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \quad g(E_F) = \frac{3n}{2E_F}$$

$$\delta = \frac{2}{g(E_F)V} \rightarrow \delta \sim \frac{1}{d^3}$$

当 d 足够小的时候  $\delta$  可以大于  $k_B T$ ,也就是热涨落幅度小于能级之间的间隔,从而电

子将会被限制在最低的能级.

#### (4)宏观量子隧道效应

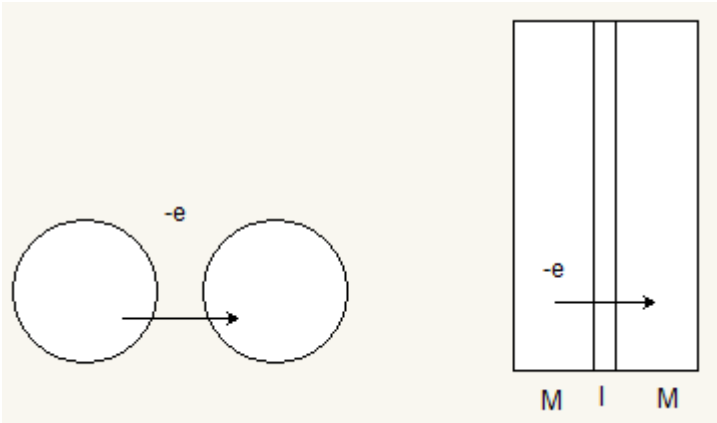
微观粒子具有贯穿势垒的能力.例如 STM 按照电子隧穿的原理检测样品表面态密度;铁磁材料中畴壁运动速度在低于某一临界值温度后基本上与温度无关;超导中的约瑟夫隧穿效应.

#### (5)库仑阻塞与库仑台阶效应

这一部分李震宇作为重点讲述了很长时间.杨金龙的 2012 版课件上对此木有讲述,李震宇课件写得难以看懂,建议看阎守胜的固体物理基础 P279 页,说得比较清楚.

什么是库仑阻塞?

根据量子尺寸效应,纳米器件的静电能变化值远远的超过热涨落,从而电荷变化非常困难.如图所示:

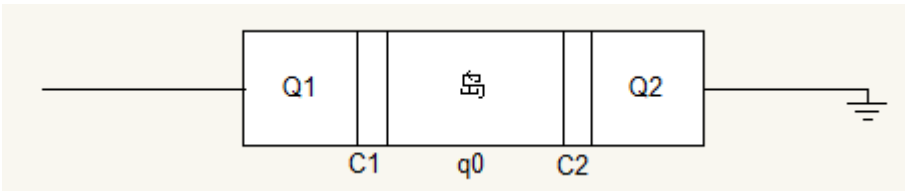


单电子从一个微粒通过绝缘层隧穿到另一个微粒,由于使体系能量变化过大而在一定范围内禁止.如上图,将体系简化成 MIM 三层来讨论.发生库伦阻塞现象的要求有二.其一,充电能  $E_c = \frac{e^2}{2C} \gg k_b T$  相当于要求电容器节相当小,工作温度足够低,宏观体系中的电学材料难以满足此要求;其二,量子力学涨落小,也就是要求电子隧穿

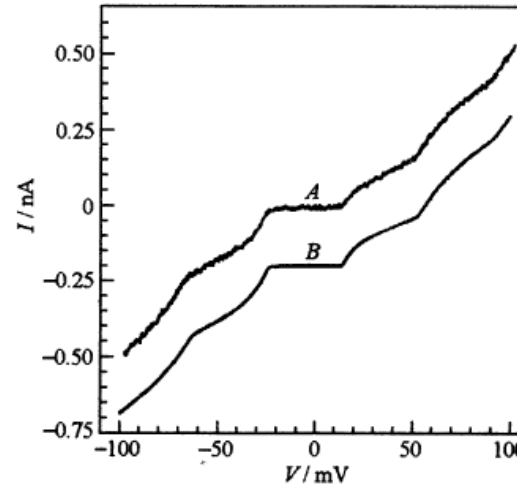
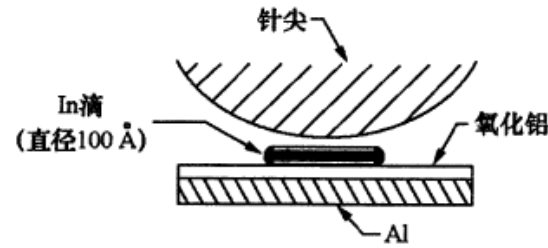
成功后体系的能量变化非常小.设定  $R_T$  为隧穿电阻,要求为:  $R_T \gg R_Q = \frac{h}{e^2}$

实验中使用的器件具体如何?

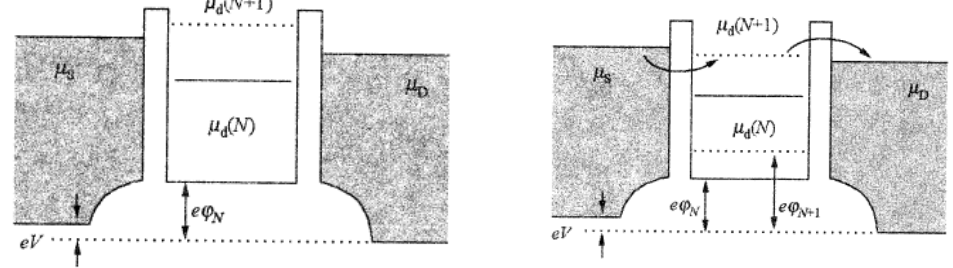
宏观器件,凡是接触的地方其电容就大到满足不了第一个条件.从而单结系统(如上图中的 MIM)无法观察到库伦阻塞.为此,设计单电子岛系统.



岛与周围环境的电容为:  $C = C_1 + C_2$ ,不受其他引线的影响.一般的,通过连接在岛上的小电容,加栅极电压往岛上注入电荷形成三极管式电路.一种实体图.STM 针尖与氧化铝样品中间放入 In 滴,通过针尖加栅极电压,得到了明显的库伦阻塞效应的 I-V 曲线示意图.中间电流不变的直线被称为库伦台阶.



量子点中的库伦效应是什么样的?



通过栅极电压调整量子点的能级高度,从而实现左图库伦阻塞与右图单电子隧穿的两种模式.由于量子点的能级分立很多,所以随着栅极电压的不断增大会检测到库伦震荡.详情请参阅阎守胜固体物理基础 P285.

## (6)介电限域效应

纳米微粒分散在异质介质中,由于界面导致的镜像粒子现象,引起的介电增强现象。界面相当于一个镜子,镜子中的镜像与本体相互作用使得宏观上的介电常数变大。纳米粒子光吸收带边移动.用 Brus 公式表述:

$$E(r) = E_g(r = \infty) + \frac{h^2 \pi^2}{2\mu r^2} - 1.786 \frac{e^2}{\epsilon r} - 0.248 E_{Ry}$$

$E(r)$ : 纳米粒子的吸收带隙  $r$ : 粒子半径

$\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$ : 折合质量

第二项: 量子限域能 (蓝移), 对应于尺寸效应

第三项: 介电限域能 (红移), 对应于界面引起的体系介电增强

## 5) 纳米材料的奇特物性

### (1). 热学性能

纳米粒子的熔点、开始烧结温度和晶化温度均比常规粉体的低得多。(表面原子数目比大,表面原子活泼)

### (2). 磁学性质

#### (a). 超顺磁性

小尺寸下,当各向异性减少到与热运动能可相比拟时候,磁化方向就不再固定在一个易磁化方向,粒子的磁化方向无规则化,导致超顺磁性出现。

#### (b). 矫顽力

纳米粒子尺寸高于超顺磁临界尺寸时通常呈现高的矫顽力,相当于每个粒子是一个单磁畴。

#### (c). 居里温度

纳米粒子中原子间距随着粒子尺寸的变小而变小(表面配位数少,多出额外的力),导致交换积分  $J$  变小.(对于这句话表示疑问)居里温度  $T_c$  与交换积分  $J$  成正比,并与原子构形和间距有关纳米粒子的  $T_c$  比固体相应的低。

#### (d). 磁化率

纳米粒子的磁性与它所含的总电子数的奇偶性密切相关。

电子数为奇数的磁化率服从: 居里-外斯定律:  $\chi = \frac{C}{T - T_c}$

量子尺寸效应使磁化率遵从  $d^3$  规律( $d$  平均颗粒直径)

电子数为偶数的磁化率服从:  $\chi = k_B T$

磁化率遵从  $d^2$  规律

## (3)光学性质

### a. 宽频带强吸收

b. 量子限域效应导致的蓝移与表面效应导致的红移(表面原子贡献出禁带中的态)

(4)表面活性及敏感特性 表面原子的  $d$  电子作用强烈。

(5)光催化性能 二氧化钛纳米粒子,调节其能带结构实现光吸收形成电子与空穴。

## 10. 原子团簇

### 1) 定义

几个,几十个,成千上万个原子的聚合体.一般的尺寸范围是 0.1 到 10 纳米.我们研究其如何由原子或分子一步步发展而成以及随着这种发展,其结构和性质如何变化。

例子:硅团簇的电子能级图,一步步的从分立的能级到复杂能级纠缠,最终形成能带。

### 2) 团簇的产生与检测

溅射,热蒸发,激光蒸发产生原子气,再冷凝得到中性团簇,然后使用电子轰击电离或者离子反应等使它带电。

电离后可以使用磁谱仪与飞行时间质谱仪等检测.(利用其带电性)

### 3) 幻数: 相对稳定的团簇中所包含的原子数称为幻数。

与构成团簇的原子键合方式相关.比较著名的幻数序列:Mackay 二十面体

$$n = 1 + \sum_{l=1}^p (10l^2 + 2), 13, 55, 147, 309, 561, \dots$$

### 4) 团簇结构中的序

团簇的幻数实际上是求解几十到几百个原子体系可能的基态的量子力学问题.相应的有序是粒子对可能的本征态占据的有序,或动量空间的有序,通常称为位置序与动量序.温度高时,德布罗意波长小于原子之间间距,位置序占据主导地位;温度低时,德布罗意波长大于原子之间间距,动量序占据主导地位。

### 5) 团簇的自发破碎与库仑爆炸定义

当两个以上电子从团簇上剥离后,团簇形成带多电荷离子簇.当团簇里的电荷分布的库伦排斥超过团簇的束缚能,团簇会发生自发破碎,也就是库伦爆炸。

### 6) 金属团簇

与自由电子气中的凝胶模型相同,金属团簇也用凝胶模型来表述.相当于将团簇看成一个大的原子核,自由电子在核外的电子轨道上运动.

### 7) 团簇的磁学性质

本来块材无自发磁化现象,但团簇中存在,只是随着原子数增加,自发磁化强度愈来愈低.

### 8) 团簇的光学性质

同之前讨论的纳米粒子.

### 9) 富勒烯家族及应用

C60,一个神奇的分子.当初最早由研究宇宙学的哥们头脑发热想能不能把碳原子那么堆起来模拟红巨星,他跟其他人交流,交流的结果就是把 C60 这玩意儿给定出来了.定出结构之后就是理论计算其能级.计算出之后再用 STM 定出实际的能级.C60 与简单分子不同的地方在于,其内部空空如野,表面上如同一个巨型的原子核的核外电子.这玩意能干啥呢?做单分子器件.

a.开关 STM 针尖压在 C60 分子上使之形变,形变前后电导变化非常大,实现开关作用.

b.晶体管 Au-C60-Au 结构,如同之前提到的单电子岛结构.两个 Au 块一个是源一个是汇.不同栅极电压下观察到了不同平台长度的库伦阻塞效应.

c.整流器 将掺杂的 C60 与其他有机物/无机物分子相结合,做成了类似于 PN 结的东西,实现整流作用.

d.震荡器 其一,类似于前面讨论的库伦震荡效应,把 C60 做成量子点,调整其栅极可以观察到明显的单电子隧穿电导震荡现象.其二,将 C60 放在碳纳米管中,势能与动能相互补充,可以计算出随着时间动能与势能的震荡图.

e.NDR STM 针尖与样品之间放两个 C60 分子,检测电导与偏压的关系时发现了 NDR 效应.理论解释:两个 C60 分子的态密度发生重合与相离.

f.导体 内嵌 Li@C60,单分子器件提供了很强大的电导.

## 第四章 维度

### 1. 二维电子气常实现于 Si 反型层及 GaAs-AlGaAs 异质结

什么是二维电子气?如同之前讨论的一维无穷长理想导体中的电子电导.对于三围的自由电子气体,沿着 z 方向对体系的尺寸限制,使得体系的能级表达式变成:

$$E_n(k) = E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \dots \text{是波矢在 } xy \text{ 平面上的分量}$$

如果限制是方势阱:

$$E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2mW^2} \quad \dots = \frac{n\lambda}{2}, \lambda \text{ 是电子的波长}$$

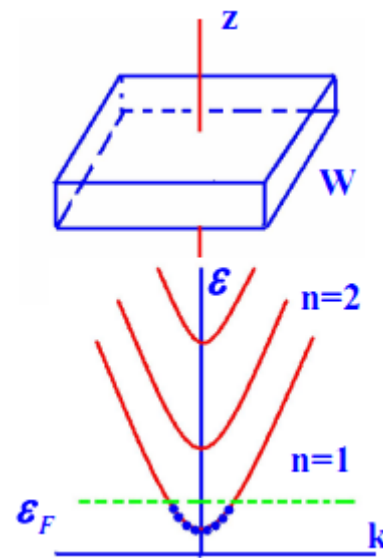
如果限制是抛物线型的限制势:

$$V(z) = \frac{1}{2} m\omega_0^2 z^2$$

$$E_n = (n - \frac{1}{2})\hbar\omega_0$$

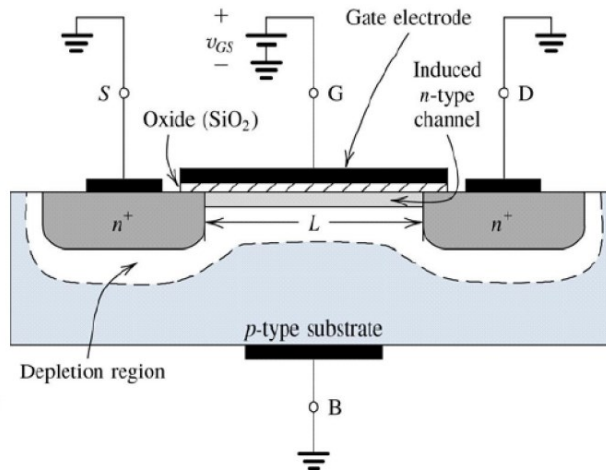
能级图像如右边图示:

一般的,电子只占据  $n=1$  的子带从而形成二维体系.原本三维中连续的 z 向的能级被限制成分立的,并且如果电子只能占据一个能级时那就相当于电子仅仅在一个平面内运动;如果电子可以占



据多个能级,那就是准二维体系.

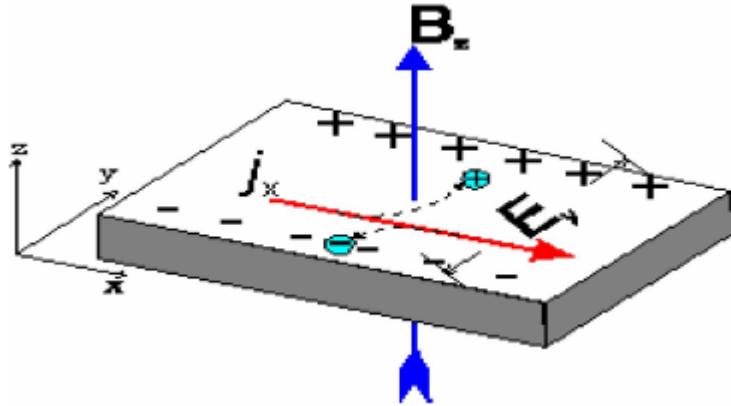
实物中,晶体管是二维电子气的一个例子.如左边的示意图所示:栅极不加电压时,相当于 npn,两个二极管对接,自然的木有任何电流从 S 流到 D.栅极加电压后,将电子吸引到 L 区,随着电压加到足够大,L 区的电子形成了薄薄的一层电子气,也就是二维电子



气,同时实现了 S 到 D 的导通.

如果在 npn 系统上加两个栅极,则可以形成两个栅极之间才能流动的电子线,也就是一维电子气.

## 2. 经典霍尔效应推导(PPT)



上图是经典霍尔效应的示意图.图示中方块导体在磁场作用下,通电流时能检测到垂直于磁场与电流方向电势.

将金属以自由电子理论模型处理.金属中电子在被杂质散射前的一段时间  $\tau$  内在电场下加速,散射后速度变成零.  $\tau$  称为弛豫时间.

电子平均迁移速度:  $v_d = -eE\tau / m$

电流密度:  $j = -nev_d = \sigma_0 E$   $\sigma_0 = ne^2\tau / m$

若存在外加静磁场,电导率和电阻率都变为张量

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{bmatrix}, \rho = \begin{bmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{bmatrix}, \text{ here } \begin{bmatrix} \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot \\ - & - \end{bmatrix}$$

when magnetic field exists

$$v_d = -e \left( E + \frac{v_d \times B}{c} \right) \frac{\tau}{m}$$

稳态时,  $j = -nev_d$ , 假定磁场沿着 z 方向,在 xy 平面内

$$\begin{aligned} \sigma_0 E_x &= \omega_c \tau j_y + j_x \\ \sigma_0 E_y &= \omega_c \tau j_x + j_y \end{aligned} \quad \omega_c = \frac{eB}{mc}$$

根据以上式子,可以得到:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c \tau)^2} & \frac{-\sigma_0 \omega_c \tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} \\ \frac{\sigma_0 \omega_c \tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} & \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c \tau)^2} \end{bmatrix} \quad \rho = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_0} & \frac{\omega_c \tau}{\sigma_0} \\ \frac{-\omega_c \tau}{\sigma_0} & \frac{1}{\sigma_0} \end{bmatrix}$$

另一方面  $\sigma_{xy} = -\frac{ne^2 c}{B} + \frac{\sigma_{xx}}{\omega_c \tau}$  由此,当  $\sigma_{xx} = 0$  时

$j_x = \sigma_{xy} E_{xy}$ ,  $\sigma_{xy}$  为霍尔电导.

$$\sigma_H = \sigma_{xy} = -\frac{ne^2 c}{B}, j = \sigma_{yx} E_x = -\sigma_{xy} E_x$$

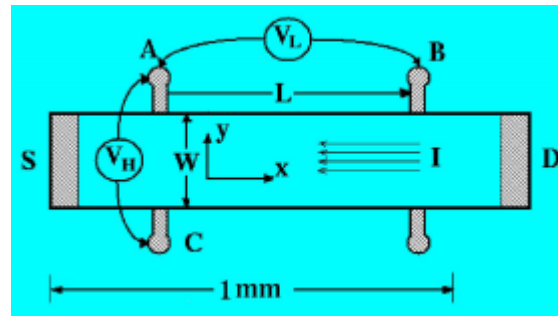
具体如何推没有从原理上明白.自己推的过程中发觉,洛伦兹力的表达形式是个关键的问题.还有稳态的定义及表达形式.PPT 上给的推导过于简练而不知其所以然.

## 3. 整数量子霍尔效应

### 1) 要求

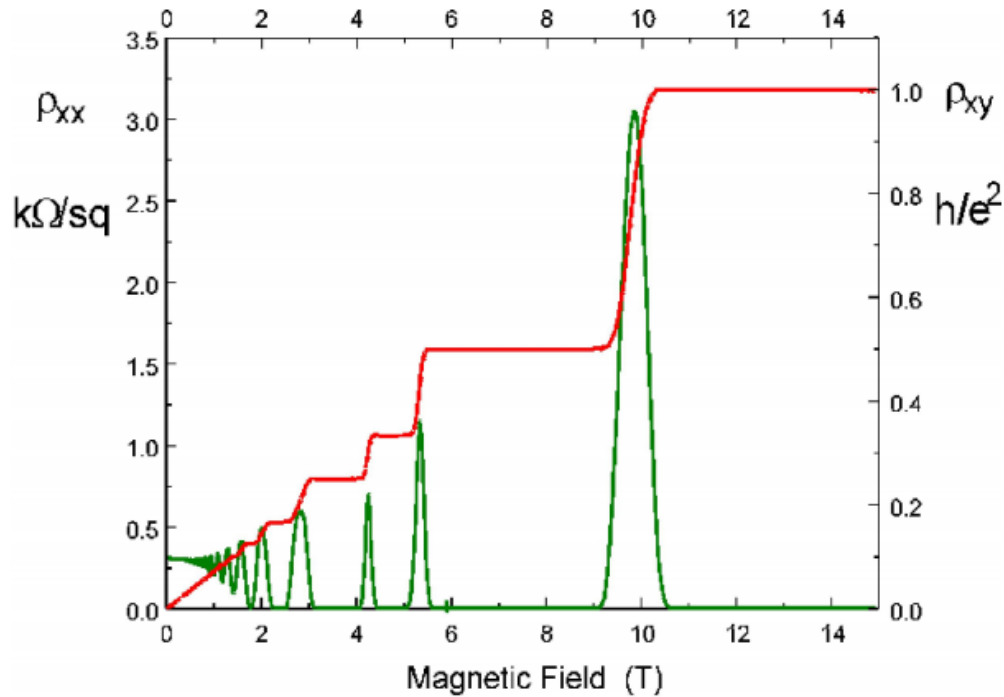
- a. 二维电子气
- b. 4K 以下极低温度.将热涨落的影响抹杀掉.
- c. 大于 10T 的强磁场.强磁场可以将能级分立.

### 2) 实验观测到的霍尔电阻特点



- a. 霍尔电阻有台阶,
- b. 台阶高度为  $h/ie^2$ , i 为整数, 对应于电子占满第 i 个 Landau 能级,台阶数值精度大约为 5ppm.极其高的精度,可以当做仪器测量电阻大小的标准.
- c. 台阶处纵向电阻( $R_{xx}$ )为零

结果示意图:



峰状曲线为  $\rho_{xx}$ , 台阶曲线为  $\rho_{xy}$

### 3) Why $R_H$ has to be exactly $(h/e^2) / n$ ? (PPT)

a. Landau 能级精确分立

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - y_0)^2 \right\} \varphi_n(y) = E_{k,n} \varphi_n(y) + eE_0 y_0 + \frac{1}{2} m \left( \frac{cE_0}{B} \right)^2$$

$$\text{where } y_0 = \frac{1}{\omega_c} \left( -\frac{\hbar}{m} B \right), \quad \omega_c = eB / mc$$

$$E_{k,n} = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{1}{2} m \left( \frac{cE_0}{B} \right)^2$$

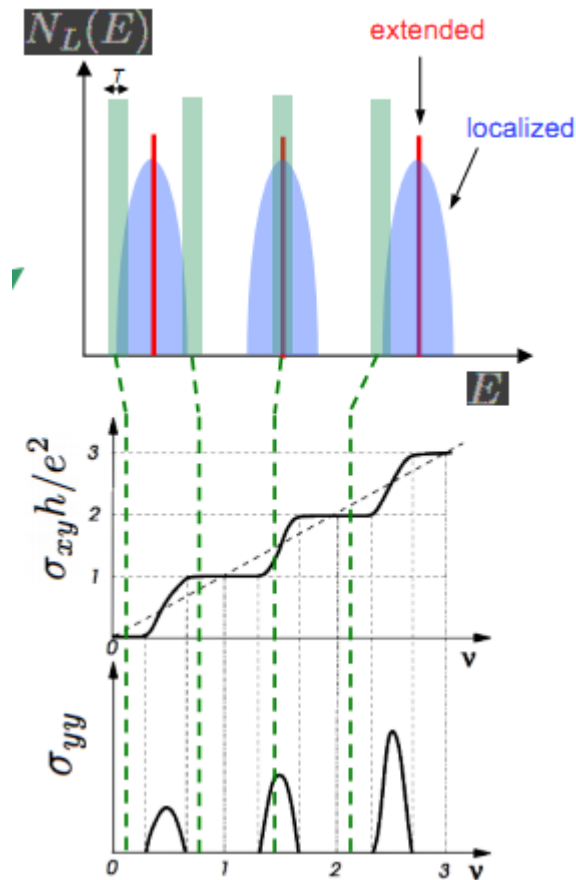
$$\varphi_{k,n}(x, y) = e^{ikx} \varphi_n(y - y_0)$$

$$\text{外场的作用将朗道能级平移了 } eE_0 y_0 + \frac{1}{2} m \left( \frac{cE_0}{B} \right)^2$$

对于上面的朗道能级的一些理解: 随着磁场  $B$  的增强, 回旋频率  $\omega_c$  增大, 也就是朗道能级裂分更大; 在  $y$  方向上分立.

b. 无序与局域化 平台

分立的朗道能级在无序的作用下展宽, 形成扩展态与局域态. 如图所示:



同时对出了整数量子霍尔效应的平台对应关系. 在量子霍尔效应平台之间, 费米能级处于扩展态中, 体系有着金属性的行为, 电子浓度变化时, 参与运输的载流子数目也发生变化, 从而霍尔效应产生的电压  $V_H$  变化, 也就是  $\sigma_{xy}$  变化,  $\sigma_{yy}$

存在值. 在霍尔平台区域, 电子浓度改变时  $V_H$  不变, 意味着载流子的浓度没有发生改变, 费米能级处在局域态范围内. 体系呈现绝缘体的特性, 相应的电子传播的  $y$  方向既没有电导也没有电阻, 检测结果中呈现零.

c. 规范对称性  $R_H$  的值

具体过程详见谷歌一下, 这里只抄一下结果:

$$R_H = \left( \frac{h}{e^2} \right) \frac{1}{\nu}, \quad \nu \text{ is int}$$

### 4) 应用:

a. 电阻标准

前面讨论中已经论述过了. 以上公式,  $h/e^2 = 25812.806$ , 精度达到  $10^{-8}$

## b. 精细结构常数的测量

原子物理中一个重要的量的值的测量.

## 3. 分数量子霍尔效应

以上公式中的  $\nu$  变成了分数.

同 IQHE 一样, Fermi 能级处于能隙位置时, 出现 FQHE 平台. 不同之处在于 IHQE 的能隙来源于单粒子态在强磁场中的量子化, 而 FQHE 的能隙来源于多体关联效应.

分数量子霍尔态是一个不可压缩的量子液体状态. 怎么理解呢, 它是一种拓扑状态, 必须施加高能量才能让它打破能垒高的 gap 达到其他的态.

## 4. 级联模型的特点:

什么叫做级联模型.

分数量子霍尔态的准粒子与准空穴结合凝聚成高阶的分数态, 如从  $1/3$  态出发, 加入准粒子得到  $2/5$  态, 加入空穴得到  $2/7$  态(具体理论推导与计算未给出), 相当于元激发的再激发过程. 准粒子由这些态激发出来并凝聚成为下一级的态.

$$\nu = \frac{p}{mp + \alpha} \quad P \text{ 是偶数} \quad \begin{array}{l} \alpha = 1 \text{ 对应于粒子型元激发} \\ \alpha = -1 \text{ 对应于空穴型元激发} \end{array}$$

- 无法解释那一个子态是较强的态.
- 几次级联后, 准粒子的数目将超过电子的数目.
- 系统在分数占据数之间没有定义.
- 准粒子具有分数电荷.

## 5. 复合费米子模型 (CF)

一个复合费米子由一个电子和偶数个磁通线构成. 复合费米子包含了所有的多体相互作用. FQHE 是 CF 在一个有效磁场下的 IQHE. CF 模型可以给出所有观察到的分数态, 包括这些态的相对强度及当减小温度, 提高样品质量时出现的次序. CF 指出:  $\nu=1/2$  态, 对应的有效磁场为 0, 是具有金属特征的特殊状态. 妈蛋完全看不懂啊喂.

## 6. 一维伊辛链在任何 $T>0$ 的温度下均无长程序存在. P255-P256

这是绪论里讨论的东西, 具体见前面, 用的是重整化群的方法.

## 7. Lindemann 判据

李震宇上课貌似木有讲到这个东西.

## 8. 拓扑激发

这个概念源自于序参量自由度  $n=2$  的二维系统的二级相变问题. 设该问题中的电子自旋只能取在  $x-y$  平面内. 低温下, 自旋的关联随着距离作代数式的衰减. 对有限尺寸的样品, 二维  $x-y$  模型的低温相呈现出表观的长程序(准长程序), 到了高温, 则为没有长程序的无序相所取代, 期间存在二级相变.

对于这段话不甚明白. 低温下关联为何衰减了?

二维点阵格点: 格点  $i$  上的自旋与  $X$  轴夹角为  $\varphi_i$ , 通过任意一些格点, 划一闭合回路  $L$ , 沿此回路逆时针方向绕行一周, 相邻两格点的方向角之差:

$$\Delta\varphi_i = \varphi_{i+1} - \varphi_i \quad -\pi < \varphi_{i+1} \leq \pi \quad \Phi_L = \sum_i \Delta\varphi_i$$

(1)  $\Phi_L = 0$ : 每个格点上自旋方向角是确定, 单值, 非拓扑性激发.

(2)  $\Phi_L \neq 0$ :  $\Phi_L = n \cdot 2\pi$  (为整数)  $n$  决定了涡旋强度, 称为拓扑荷. 每个格点上自旋的方向角将是多值拓扑的, 拓扑性激发.

PPT 上给出了几张涡旋的图, 可以帮助理解.

## 9. 拓扑性元激发之间的相互作用

拓扑性元激发的相互作用在形式上等同于二维点电荷之间的相互作用. 这些二维点电荷位于拓扑性元激发的位置上, 其电荷量正比于该拓扑性元激发的拓扑荷.

二维点电荷的理解: 三维中点电荷满足的泊松方程少一个自由度, 变成二维点电荷泊松方程; 简单的说, 就是一张纸上加了一个小点.

## 10. K-T 相变

李震宇在课堂上没有讲述太多, PPT 内容也很少. 阎守胜固体物理基础中讲得稍微详细些.

定义: 绪论中传统的相变理论认为, 序参量发生了零转变成有限值的温度点为相变点.

但二维体系的序参量在任何温度下均为零.Kosterlitz 与 Thouless 两人提出,当序参量自由度为 2 的时候,拓扑性质可随温度发生变化,提出了拓扑序和拓扑相变. 低温下正反拓扑缺陷(涡旋)两两配对,温度升高到相变温度以上后,配对被热运动所拆散,出现大量的自个跟自个玩的拓扑缺陷(单个涡旋).

特点:a.自由能的第 n 级微商在相变点出现突变就称为第 n 级相变。K-T 相变是无穷级,是一种极其微弱的相变 b.从低温到相变点时,超流密度并不连续的趋于零,而是在相变点上出现有限的跳跃(这句话不明白).

### 11. 拓扑序

在低温下, 拓扑缺陷或称为拓扑元激发配对的有序性称为具有拓扑序, 配对的拆散表示这种序的消失。见 K-T 相变定义.

### 12. 二维晶格融化

PPT 上无.阎守胜固体物理基础 P308.

相应于三维晶体从固态转变成液态的融化过程,二维晶格融化其实就是 K-T 相变的过程.

### 13. 公度相

PPT 上无.阎守胜固体物理基础 P310.

表面吸附层二维体系,在低温下吸附原子会形成由衬底周期势决定的长程有序的二维晶格.

### 14. Peierls 不稳定性与 Peierls 相变

什么叫做一维体系.实际中,导电聚合物,金属卤化物,KCP 晶体,过渡金属三硫化物等均可以认为是一维体系.

一维体系的电子能带结构.固体物理中的基础问题.

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \dots \quad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \dots$$

以上是近自由电子近似推导得到的结果.对于能隙的出现,PPT 上给出的解释是电子-声子相互作用的结果.波长为  $\lambda$  的电子在一维晶格中传播,受格点反射,相邻两格点反射波位相差:  $\Delta\phi = 2a \times 2\pi / \lambda$  长波时  $\Delta\phi$  很小,基本上可以认为无散射作用;短

波至  $2a$  时,相位差  $2\pi$ ,没法继续传播了,只能跳跃.

对于半满能带的一维晶格,等距离的原子排列是不稳定的,要发生二聚化,晶格周期变为  $2a$ .此时布里渊区边界与费米面重合,电子能量降低,系统更稳定.

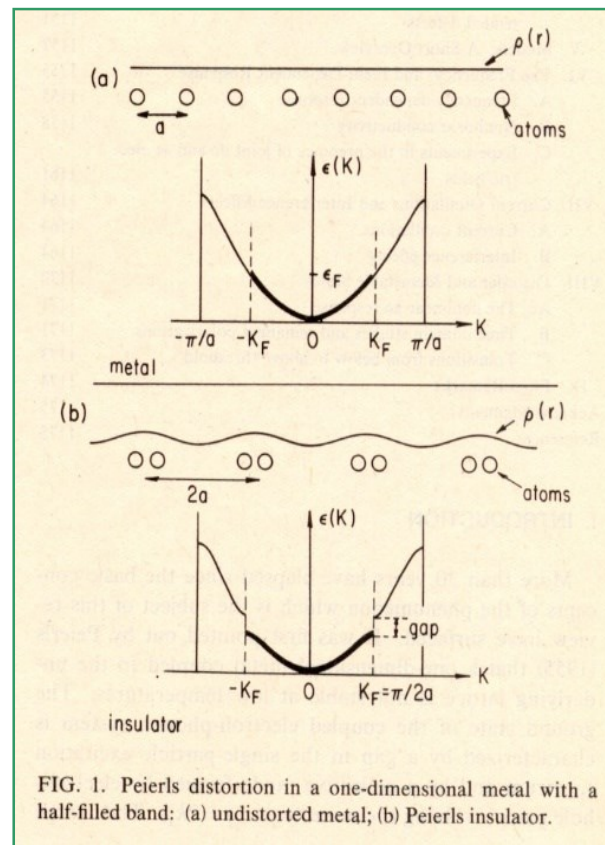


FIG. 1. Peierls distortion in a one-dimensional metal with a half-filled band: (a) undistorted metal; (b) Peierls insulator.

具体示意图如左.低温下,一维体系处于二聚化的半导体或绝缘体状态,不导电.温度升高,电子获得热能,费米面上的能隙消失,一维体系变成导体.

### 15. 电荷密度波与自旋密度波

一维体系发生 Peierls 相变后,晶格周期由  $a$  变为  $a'$ ,形变后周期为  $a'$  的晶格称之为超晶格.电子密度在这一新的周期场中重新分布,称为 CDW,波长= $a'$ .

左图中(b)所示,一维晶格体系二聚后粒子所带电荷重新分布,形成电荷密度涨落,也就是电荷密度波.

考虑电子之间的相互作用,需计入电子的自旋,正负自旋电子的 CDW 位形可以不同,

$\phi_{\uparrow} \neq \phi_{\downarrow}$ . 此时将会导致体系

中出现自旋密度的起伏,即自旋密度波(SDW)。简略的数学描述:

$$\rho_{\uparrow}(x) = n/2 + (n_c/2)\cos(2\pi x/\lambda + \phi_{\uparrow})$$

$$\rho_{\downarrow}(x) = n/2 + (n_c/2)\cos(2\pi x/\lambda + \phi_{\downarrow})$$

$$\rho(x) = \rho_{\uparrow}(x) + \rho_{\downarrow}(x) = n + n_c \cos\left(\frac{(\phi_{\uparrow} - \phi_{\downarrow})}{2}\right) \cos\left(2\pi x/\lambda + \frac{(\phi_{\uparrow} + \phi_{\downarrow})}{2}\right)$$

$$S(x) = \rho_{\uparrow}(x) - \rho_{\downarrow}(x) = n_c \sin\left(\frac{(\phi_{\uparrow} - \phi_{\downarrow})}{2}\right) \cos\left(2\pi x/\lambda + \frac{(\phi_{\uparrow} + \phi_{\downarrow} - \pi)}{2}\right)$$



# 第五章 关联

## 1. 凝胶模型

认为带正电荷的离子实的作用仅在于维持体系的电中性,且正电荷背景均匀分布于金属所占的空间,称为金属的凝胶模型。

单电子近似的理论基础.详细论述见阎守胜固体物理基础第三章能带论引言部分。

假定在体积  $V = L^3$  中有  $N$  个带正电荷  $Ze$  的离子实,相应的有  $NZ$  个价电子.电子与离子实的位置矢量分别使用  $\mathbf{r}_i$  与  $\mathbf{R}$  表示.

$$H = -\sum_{i=1}^{NZ} \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} - \sum_{i,j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{n=1}^N \frac{\hbar^2 \nabla_n^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{m,n} \frac{1}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_n|} - \sum_{i=1}^{NZ} \sum_{n=1}^N \frac{1}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_n|} \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_n|}$$

第一二项分别是  $NZ$  个电子的动能与库伦相互作用能;第三四项分别是  $N$  个离子实的动能与库伦相互作用能.最后一项是电子与离子实之间的库伦相互作用能.这里已经忽略了,电子自旋,离子实自旋,磁矩之间的相互作用。

这样的问题几乎是没有任何办法解出来的. $N$  的量级是  $23$  次方,作用项极其多以至于可能超越整个宇宙中的星球数目的计算次数才能将薛定谔方程解出.从而在实际运用中必须引入近似。

第一个引入的近似是绝热近似,也称为 Born-Oppenheimer 近似.基于电子与离子实在质量上的巨大差别,假定离子实在运动的每一个瞬间,电子的运动都快到足以调整其状态到离子实瞬时分布情况下的本征态.当我们只关注电子体系的运动时,可以认为离子实固定在其瞬时位置上。

第二个引入的近似是忽略晶格振动.一般温度下,离子实总是围绕其平衡位置作小幅度振动,零级近似下,所有的  $\mathbf{R}$  用其平衡位置代替。

第三个引入的近似是单电子近似.电子-电子相互作用的库伦势项用一个平均场势代替。

第四个引入的近似是周期场近似.认为晶体中不管单电子势的具体形式如何,其必定满足晶格平移对称性。

最终,之前巨长的哈密顿量,简化成了: 
$$H = -\sum_{i=1}^N \left( \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \dots \right) (r)$$

这个问题的求解过程,从简单到复杂有很多种方法.对于不同的体系,若是遇到了不能采取以上讨论的那些近似的体系,需要加入项。

Hartree 方程:将总电子波函数写成基函数的连乘积形式.势能项考虑电子-电子相互作用.首先假定一组基,代入方程按照变分原理选取一组基使得本征能量达到最小,然后根据这组基把势能项算出来,代回源方程,再找一组基.如此循环到自治。

Hartree-Fock 方程:为了总电子波函数满足 Pauli 不相容原理,采取 Slater 行列式形式将基函数表述出来。

Koopmann 定理:单电子轨道能量等于  $N$  电子体系从第  $j$  个轨道上取走一个电子并保持  $N-1$  个电子状态不变的总能变化值。

Fermi hole:与某电子自旋相同的其余邻近电子在围绕该电子形成总量为一的密度亏欠域。

Slater's Xa method:HF 方程未有考虑到关联作用;HF 方程对固体计算量实在太大了.于是用平均的局域(交换)势替代 HF 方程中的非局域交换势.相当于,HF 方程将一个原子算作势中的一项,而此处划分基团,将多个原子归为一个基团,计算集团的势与集团之间的相互作用,计算量会比 HF 方程小很多。

## 2. 密度泛函理论

### 1) The Hohenberg-Kohn Theorem (证明)

Hohenberg-Kohn 理论表述:对于非简并基态的分子,其基态能量,波函数以及所有其他的分子电子性质唯一地取决于基态电子概率密度  $\rho_0(x, y, z)$ ,即是  $E_0 = E_0[\rho_0]$

证明过程(详见 PPT)

The electronic Hamiltonian is

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^n v(\vec{r}_i) + \sum_{j>i}^n \frac{e^2}{r_{ij}} - \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{r_{i\alpha}}$$

$v(\vec{r}_i)$  is called the external potential acting on electron  $i$ , for it is produced by charges external to the system of electrons. Once the external potential  $v(\vec{r}_i)$  and the number of electrons  $n$  are specified, the electronic wave functions and allowed energies of the molecule are determined as the solutions of the electronic Schrodinger equation.

Now we need to prove that the ground-state electron probability density

$$\rho_0(\vec{r}) \text{ determines } \begin{cases} A. \text{ the external potential} \\ B. \text{ the number of electrons} \end{cases}$$

$$\int \rho_0(\vec{r}) d\vec{r} = n \rightarrow \text{proof of B}$$

证明 A 采取反证法. 假设 A 是错误的, 对于同样的基态电子密度  $\rho_0$  存在两个外势  $v_a$  与  $v_b$  (二者非常数差).

$$\widehat{H}_a = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^n v_a(\vec{r}_i) + \sum_{j>i}^n \frac{1}{r_{ij}} \quad \widehat{H}_a \Psi_{0,a} = E_{0,a} \Psi_{0,a} \quad 1$$

$$\widehat{H}_b = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^n v_b(\vec{r}_i) + \sum_{j>i}^n \frac{1}{r_{ij}} \quad \widehat{H}_b \Psi_{0,b} = E_{0,b} \Psi_{0,b} \quad 2$$

$\widehat{H}_a$  与  $\widehat{H}_b$  相差一个非常数函数, 根据假设,  $\Psi_{0,a}$  与  $\Psi_{0,b}$  相同

$$1 \text{ 减 } 2 \text{ 得到: } \left( \sum_{i=1}^n (v_a(\vec{r}_i) - v_b(\vec{r}_i)) \right) \Psi_{0,a} - (E_{0,a} - E_{0,b}) \Psi_{0,a}$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^n (v_a(\vec{r}_i) - v_b(\vec{r}_i)) = \text{constant}$$

与假设相悖, 从而证明了 A.

### 2) The Hohenberg-Kohn variational theorem (证明)

For every trial density function  $\rho_r(\vec{r})$  that satisfies  $\int \rho_r(\vec{r}) d\vec{r} = n$  and  $\rho_r(\vec{r}) \geq 0$  for all  $\vec{r}$ , the following inequality holds:  $E_0 \leq E_v[\rho_r]$ , where  $E_0$  is the true 基态

证明过程: 详见 PPT

By the Hohenberg-Kohn theorem,  $\rho_r(\vec{r})$  determines the external potential  $v_r$ , and this in turn determines the wave function  $\Psi_r$  that corresponds to the density  $\rho_r(\vec{r})$ . Let us use the wave function. According to the variation theorem as a trial variation function for the molecule with Hamiltonian  $\widehat{H}$ . According to the variation

$$\text{theorem } \langle \Psi_r | \widehat{H} | \Psi_r \rangle = \left\langle \Psi_r \left| \widehat{T} + \widehat{V}_{ee} + \sum_{i=1}^n v(\vec{r}_i) \right| \Psi_r \right\rangle \geq E_0 = E_0(\rho_0)$$

Since the left hand side of this inequality can be rewritten as

$$\widehat{T}[\rho_r] + \widehat{V}_{ee}[\rho_r] + \int \rho_r v(\vec{r}) d\vec{r} = E_v[\rho_r] \geq E_0$$

### 3) Local density approximation LDA

该近似认为交换相关能量泛函仅仅与电子密度在空间各点的取值有关 (而与其梯度、拉普拉斯等无关)。尽管有多种方法都能体现局域密度近似, 但在实际中最成功的是基于均匀电子气模型的泛函 (其他各种表达形式详见 PPT, 公式比较麻烦就不打了)。

$$E^{xc}[\rho] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon^{xc}(\rho) d\vec{r}$$

$\rho(\vec{r})$  为电子密度,  $\varepsilon^{xc}(\rho)$  为交换相关能量密度, 它仅仅是电子密度的函数。交换相关能可以分解为交换项与相关项:

$$\varepsilon^{xc} = \varepsilon^x + \varepsilon^c$$

均匀电子气模型给出的表达式:

$$E^{xc}[\rho] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon^{xc}(\rho) d\vec{r}$$

$$\varepsilon^{xc} = \varepsilon^x + \varepsilon^c$$

$$\frac{E^{xc}[\rho]}{N} = -\frac{0.916}{r_s} + [0.0622 \ln(r_s) - 0.096] + [0.004 \ln(r_s) - 0.0232] r_s \quad \frac{1}{\rho} = \frac{4}{3} \pi r_s^3$$

第一项是均匀电子气项; 第二项是关联项; 第三项是微扰项。

### 3. Comments on the DFT methods

(1) 与 HF 方程相同, DFT 的 KS 方程也是通过自洽的方式计算结果

(2) 计算时间与 DFT 基础方程的数目的三次方成正比

(3) DFT 中不存在 密度函数分子波函数

(4) 与 HF 轨道相同, KS 轨道可用于 MO 中作讨论。

(5) Koopmann 定理在此不成立. 除了  $\varepsilon_i^{KS}(\text{HOMO}) = -IP(\text{HOMO})$

(6)  $E^{xc}[\rho]$ 用于分子 DF 计算。  $\varepsilon^{xc} = \varepsilon^x + \varepsilon^c$ ，交换项与关联项

(7)人们认为 KS DFT 方法比 HF 方法的结果更加好且计算量低不少

(8)DFT 理论的应用:construct model many-body Hamiltonian; Thermal and transport properties; Magnetism, Spin-Orbit coupling; Quasiparticle excitation; Phonon structure and Electron-Phonon coupling, superconductivity; Ground state properties.

(9)Jacob's ladder:

Earth Hartree Theory:+Local density;+Density gradient;+Inexplicit occupied orbital information;+Explicit occupied orbital information;+Unoccupied orbital information→Heaven of Chemical Accuracy

密度泛函理论新进展部分直接略过,内容过于大并且对于非量子化学计算方向的学生毫无意义.

#### 4.费米液体

什么是费米体系.

费米子系统的费米能级对应的温度成为费米温度:

$$T_F = \frac{1}{k_B} \lim_{T \rightarrow 0} \mu \quad \mu \text{ is chemical potential} \quad T_F = \frac{1}{2mk_B} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

费米简并系统:低于费米温度的体系( $T_F$ 非常大,对于一般金属为 $10^4 K$ ,远远高于常

温).系统的性质由数目有限的低激发态决定(常温下金属费米能级附近少量激发到能级之上的电子).费米温度给出了系统中元激发存在与否,多少的标度.

金属自由电子气相关的一些计算.

$$\text{自由电子能量 } \varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \dots \quad \frac{2\pi}{\lambda} \quad \dots \quad \dots \quad \dots \times \frac{\sqrt{V}}{8\pi^3} \times \frac{4}{3} \pi k_F^3 = N \rightarrow$$

$$k_F^3 = 3\pi^2 n \quad \varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad \dots \quad \dots \quad \dots = \varepsilon_F / k_B \text{ 一般的, 这些量为}$$

$$k_F \approx 10^8 \text{ cm}^{-1} \quad \varepsilon_F \approx 2 \sim \dots \quad \dots \approx 10^8 \text{ cm} / \text{s} \quad T_F \approx 10^4 \sim 10^5 \text{ K}$$

$$\text{每个电子的平均动能 } \bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} \varepsilon_F \quad \text{能态密度 } g(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2 \hbar} (\dots)^{1/2} \quad g(\varepsilon_F) = \frac{3}{2} \frac{n}{\varepsilon_F}$$

$$\text{电子势能 } \varepsilon_p = \sum_{ij} \frac{e^2}{r_{ij}} \propto n^{1/3}$$

在高密度下,电子动能为主,自由电子气模型是较好的近似.在低密度下,电子之间的势能或关联变得越来越重要,电子可能由于这种关联作用进入液相甚至晶相.较强关联下,电子系统被称为电子液体或费米液体.

#### 5.朗道费米液体理论

主要思想:单电子图象不是一个正确的出发点,但只要把电子改成准粒子或准电子,就能描述费米液体.准粒子遵从费米统计,准粒子数守恒,因而费米面包含的体积不发生变化.

适用条件:

1) 必须有可明确定义的费米面存在

在平衡态下,  $n_i$  服从费米分布  $n_i = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} + 1}$   $\varepsilon(p)$ 与温度有关

$n(k) = Z(k)\theta[\mu - \varepsilon(k)] + \Phi(k)$   $\Phi(k)$ 是一个连续变化函数。

一个准粒子可以看作由一个裸粒子(比例为  $Z$ )加上周围其他元激发的贡献(比例为  $1-Z$ ) $m \rightarrow m^* = m/Z$  正常费米液体要求  $0 < Z < 1$  或者  $Z=1$ ,一旦  $Z=0$ ,准粒子图像失效.

2) 准粒子有足够长的寿命

朗道费米液体理论是处理相互作用费米子体系的唯象理论。

在相互作用不是很强时,理论对三维液体正确。

二维情况下,多大程度上成立不知道。

一维情况下,不成立。-> luttinger 液体

一维:低能激发为自旋为 1/2 的电中性自旋子和无自旋荷电为  $\pm e$  的波色子的激发。

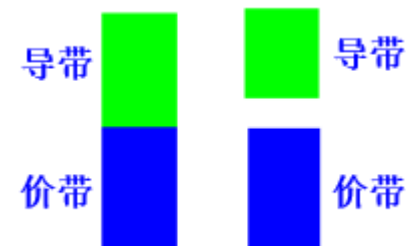
详细费米液体理论推导及性质见 PPT,纯英文,李震宇上课貌似没怎么讲,故不花心思去弄了.

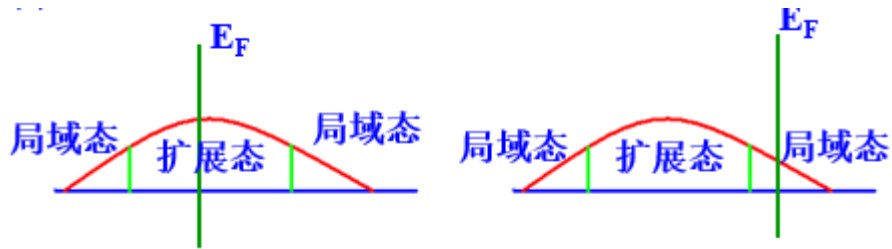
#### 6. 金属与绝缘体的转变机制

1) 能带论框架下的转变

右图所示.重合与否决定载流子类型与数目.中间还有个熊孩子叫做半导体.

2) 无序引起的安德森转变





无序一章中讨论过此类模型.无序导致体系的能带分成扩展态与局域态,然后看费米能级所在位置,如果在扩展态则为金属,在局域态则为绝缘体.这个模型下如何定义半导体?

### 3) Mott 金属绝缘体的转变

之前两个理论模型,能带与无序均未考虑电子之间的关联作用.所以在预测一些化合物的导电性质时发生错误.如 MnO, 5 个 3d, 未半满, O2p 满带不与 3d 重叠, 能带论说这个 3d 带将拥有金属导电性, 其实是绝缘体. f 电子与 d 电子波函数的分布范围是否和近邻产生重叠, 是电子离域 or 局域化的基本判据. 多电子态的局域化强度的顺序为: 4f > 5f > 3d > 4d > 5d; 另外, 从左往右穿过周期表, 部分填充层半径逐步降低, 关联性增加. 因为关联性增强, 强到一定程度, 就让能带变得窄到无法与导带重合.

## 7. 模型假象实验及能带论失效简述

见上第三小点. 假象实验这个在 PPT 中找不到.

## 8. Hubbard 模型简述

这部分我明明听过课啊, 为何一点感觉都没有.

Hubbard 模型是处理周期晶格中多粒子关联的量子理论模型. 模型假定体系的哈密顿量包含两项, 包含不同晶格位置的离子 hopping 的动能项和包含位置关联作用的势能项.

The Hubbard model is based on the tight-binding approximation from solid state physics. In the tight-binding approximation, electrons are viewed as occupying the standard orbitals of their constituent atoms, and then 'hopping' between atoms during conduction. Mathematically, this is represented as a 'hopping integral' or 'transfer integral' between neighboring atoms, which can be viewed as the physical principle that creates electron bands in crystalline materials, due to overlapping between atomic orbitals. The width of the band depends upon the overlapping amplitude. However, the more general band theories do not consider interactions between electrons explicitly. They consider the

interaction of a single electron with the potential of nuclei and other electrons in an average way only. By formulating conduction in terms of the hopping integral, however, the Hubbard model is able to include the so-called 'onsite repulsion', which stems from the Coulomb repulsion between electrons at the same atomic orbitals. This sets up a competition between the hopping integral, which is a function of the distance and angles between neighboring atoms, and the on-site Coulomb repulsion, which is not considered in the usual band theories. The Hubbard model can therefore explain the transition from metal to insulator in certain transition metal oxides as they are heated by the increase in nearest neighbor spacing, which reduces the 'hopping integral' to the point where the onsite potential is dominant.

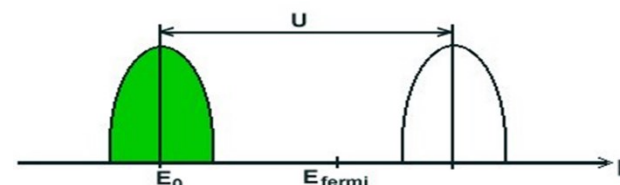
The hydrogen atom has only one electron, in the so-called s orbital, which can either be spin up ( $\uparrow$ ) or spin down ( $\downarrow$ ). This orbital can be occupied by at most two electrons, one with spin up and one down (Pauli exclusion principle).

Now, consider a 1D chain of hydrogen atoms. Under band theory, we would expect the 1s orbital to form a continuous band, which would be exactly half-full. The 1-D chain of hydrogen atoms is thus predicted to be a conductor under conventional band theory.

But now consider the case where the spacing between the hydrogen atoms is gradually increased. At some point we expect that the chain must become an insulator.

Expressed in terms of the Hubbard model, on the other hand, the Hamiltonian is now made up of two components. The first component is the hopping integral. The hopping integral is typically represented by the letter t because it represents the kinetic energy of electrons hopping between atoms. The second term in the Hubbard model is then the on-site repulsion, typically represented by the letter U because it represents the potential energy arising from the charges on the electrons. Written out in second quantization notation, the Hubbard Hamiltonian then takes the form:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + U \sum_{i=1}^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad \langle i,j \rangle \text{ nearest-neighbor interaction}$$

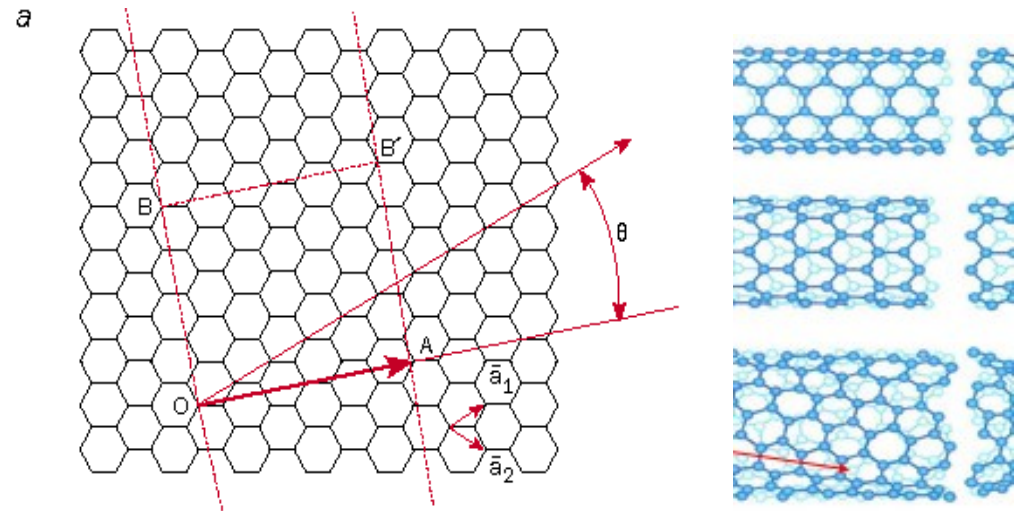


以上内容摘自 wiki. 通俗易懂就是篇幅大了些. Mott-Hubbard transition: 左图所示为 Hubbard 模型能带图.

$T \uparrow$ , 下 Hubbard 带  $e \rightarrow$  上 Hubbard 带, 形成电子空穴对激子  $V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon}$   
 $T \uparrow \uparrow$ , up Hubbard band hold enough electrons, 屏蔽作用使得电子空穴  
 衰减为:  $V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon} e^{-k_0 r}$  当电子浓度达到临界值, 使得屏蔽长度  $l/k_0$  短于  
 电子空穴对的尺度  $a_0$ :  $a_0 k_0 > 1$  时, 束缚接触电导急剧增加, 过渡到金属

## 专题一 碳纳米管

### 1. 碳纳米管的结构与分类



螺旋矢量. 上图 OA, 以此矢量为圆柱周长将 OA 接合在一块儿, 得到碳纳米管, 同时也用这个矢量来表征碳纳米管. (m,n)

螺旋角度. 上图  $\theta$  OA 与石墨烯格子平面基矢之间的夹角, 由于基矢之间夹角六十度, 取小角.

按照 OA 分类分成, ZIGZAG(m,0), ARMCHAIR(m=n), CHIRAL(m 不等于 n). 示意图如上右图示.

制备方式:

Arc-discharge: good quality, yield; MWCNT, SWCNT available; covered with amorphous C(unclean)

Laser Vaporization: + Large and aligned SWNT yield; + Greater control over growth condition; + absence of high electric field; - expensive process

Catalytic Decomposition: + SWNT, MWNT on any substrate; - nanotubes weaker, often uncapped; - Faulty graphitization, often at the tips

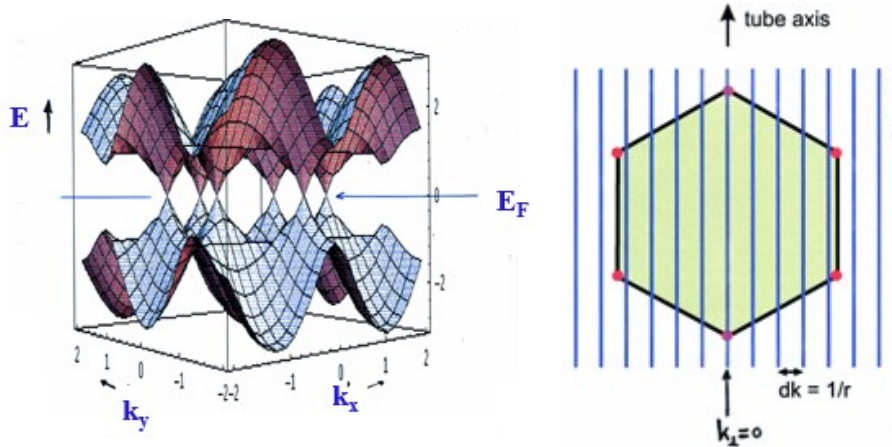
### 2. 碳纳米管的性质

a 电子结构:  $(n-m)/3$ ; 整数  $\leftrightarrow$  金属导电性(所有的椅式); 非整数  $\leftrightarrow$  半导体(三分之二的锯齿, 螺旋碳纳米管) bandgap: (正比于曲率的倒数) 大约 100meV 外加磁场可以影

响禁带宽度.

b 磁性质:抗磁性. 磁化系数是各向异性的.

c 能带结构:类比于存在六个点相接合的石墨烯



碳纳米管因为弯曲了一个自由度,从而在那个自由度对应的到空间中的能带线分布从准连续变得不连续,  $dk = 1/r$ .所以原本的六个点如果木有经过这些分立的线,则存在 bandgap,为半导体;如果经过,则为金属.

d 机械性能:杨氏模量,SWCNT 1TPa, MWCNT 1.25TPa, 完虐钢铁 230GPa 密度 1.3-1.4g/cm<sup>3</sup> 最大拉伸强度: 30GPa

e 热性能:导热系数 2000W/m\*k, 完虐金属铜 400W/m\*K

### 3.碳纳米管的应用

这部分貌似不会细考

a.单分子器件

纳米碳管晶体管.将纳米碳管搭在 source 与 drain 之上形成基本的晶体管构型.进一步可以做成碳纳米管逻辑门.

常温下碳纳米管单电子晶体管.将一根碳纳米管在某处折成 S 型.

纳米碳管提供电子束源.用于刻蚀.

纳米碳管彩色显示器

基于碳纳米管的场发射 X-ray 射线管

b.纳米探头与传感器

AFM STM tips. 纳米钳子. 纳米共振器 纳米弹簧 化学物质传感器 化学致动器 IR 检测器 机械剥离传感器 碳纳米管热温度计 纳米碳管生物传感器 滤氢气装置

c.能源存储

燃料电池

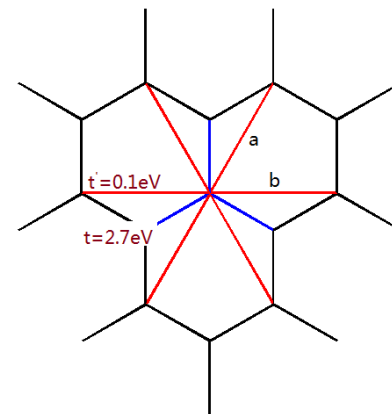
### 4.石墨烯的结构与性质

a.制备

机械剥离;外延生长;液相氧化还原;CVD 气相沉积.目前尚未找到一种低成本的可以制备出结构较完美性能可以用的石墨烯.其本质,单分子层何以稳定下来,原因有两点,与基底之间相互作用;z 方向上自由能级波纹状起伏.自然的,石墨烯难以离开基底而稳定存在,或者说,难以做成真正可以用的器件而保持原本的性质.

b.结构

单分子层二维结构.



用 tight-binding approach 来描述体系.近邻项与远处的项,哈密顿量描述为:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) - t^\dagger \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + d_{i,\sigma}^\dagger d_{j,\sigma} + d_{j,\sigma}^\dagger d_{i,\sigma})$$

$\langle i,j \rangle$  nearest-neighbor interaction  
 $\langle\langle i,j \rangle\rangle$  second nearest-neighbor interaction

石墨烯的能带结构如前面碳纳米管讨论部分所述.费米面六个接合的点上下是两个顶对顶的锥

面.称为 Dirac cone.

c.性质

存在最低电导.具体为什么 PPT 上木有说明.打开石墨烯的能带是石墨烯应用的一个重要课题.在 SiC 衬底上,石墨烯的能带是打开的?PPT 同样说得不清楚.存在量子反常霍尔效应.具体亦未作说明.

d.石墨烯纳米带

实际中不可能制备出无穷大的石墨烯平面,从而制备出的东西叫做石墨烯纳米带.也就是相当于将之前讨论的碳纳米管一刀切开.切口附近分成三种,椅式,锯齿式和螺旋式.一般的带的两边结构对称,表现在能带结构上是上下对称;可以通过不对称的分子修饰打破这种对称性,改变能带的结构,获得其他性质.

这一部分内容说得不清楚.

# 专题二 扫描隧道显微镜

## 1. 探测材料微观结构的仪器有哪些?

a. Electron Microscopy 利用电子束轰击样品,或透射或散射产生图像,并且由于电子束的波长远远短于光(电子束波长,TEM 200kV  $2.5 \cdot 10^{-12}m$ ,可见光几百 nm)从而可以获得高得多的分辨率(0.2nm).利用此技术的显微器有:TEM 透射电子显微镜,利用超高强度的电压加速电子并轰击样品,由于电子束能量非常强,甚至可以穿过薄层的样品,这也是透射一词的来源. SEM 扫描电子显微镜,加在电子上的电压比 TEM 小一个量级,从而电子束的波长长些,能量低些,基本上无法穿透样品,但利用在样品表面散射的电子成像,可以得到景深大的背散射像.自然的,分辨率没有 TEM 那么高.

b. Confocal Microscopy 处理景深问题.当景深过大时候,样品大数目层数的粒子均可以成像,从而图像模糊不清;如果这个时候用另一个显微装置同时一起盯着同一个地方看,就像人类两只眼睛共聚焦形成单平面像和单反相机中的单平面摄像一般,就可以仅仅让一层粒子成像.然后逐步从样品上方扫描到样品下方,形成三维的整体的像.

c. Scanning Probe Microscopy 利用靠近样品表面的探针与样品之间的作用,移动探针,构成样品表面的图像模型.利用这个技术的,经典的是 STM,对于导电样品,检测隧穿电流,可以达到 0.01nm 的分辨率. AFM 对于任意样品,检测针尖与样品表面的作用力矩,检测样品表面形貌.

## 2. STM 的基本原理

详见固体物理实验方法 2 本人整理课件.

针尖与样品之间有一个势垒,样品表面态上的电子能量小于该势垒.

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + U(z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \cdot J(z) \quad \Psi(x) = \Psi(0)e^{-\kappa z} \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(U-E)}}{\hbar}$$

$\Psi(x)$  可以表征隧穿到针尖处的电子波函数.也就是隧穿电流:

$$I \propto |\Psi(x)|^2 \propto e^{-2\kappa z} \quad z \text{ 增大 } 0.1nm, I \text{ 减小约一个数量级.}$$

针尖上加偏压,可以调节样品表面态的能级,使其高于 or 低于针尖能级探测表面态的形貌;找到最容易观察的形貌以统计检测样品表面形貌.

## 3. STM 的工作方式

具体详见固体物理实验方法 2 本人整理的笔记.

STM 实验中有(x,y,z,V,I)五个变量.

通常扫描图象时常保持 V 恒定.

测量 I(V)谱(扫描隧道谱 STS)时, V 是变化的.

STM 的工作模式

恒流模式 (V,I)=const. (x,y)/z,测量电子态的空间分布

等高模式 (V,Z)=const. (x,y)/I,测量态的分布与贡献

恒阻模式

可变间距模式

恒定平均电流模式

## 4. 了解一下 Simmons 理论、Bardeen 公式、Tersoff-Hamann 模型、STM 的分子轨道理论、STM 矩阵元法 (MBA)、STM 非微扰理论

a. Simmons 理论 静电近似方法,之前 STM 基本原理中提到的.

b. Bardeen 公式 1960 年 Bardeen 利用多体理论发展了时间相关微扰理论,可以计算电子从一个电极(样品  $E_s, \psi_s$ ) 转移到另外一个电极(针尖  $E_t, \psi_t$ ) 的速率.从 ( $E_s, \psi_s$ ) 向 ( $E_t, \psi_t$ ) 跃迁的几率方程为:  $\omega = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_t | V | \psi_s \rangle|^2 \rho_s(E_s - E_t)$  问题的关键在于求

隧穿矩阵元 M. 已知 M 则可对所有可能状态求和来计算隧道电流,即:

$$I = -\frac{4\pi e}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} [f_s(E+eV) - f_t(E)] \rho_s(E+eV) \rho_t(E) |M|^2 dE$$

c. Tersoff-Hamann 用球形渐近波近似表示针尖波函数,然后计算隧穿矩阵元,再计算隧穿电流.模型结论:隧道电流正比于针尖曲率中心处费米能级附近的样品的局域态密度.小偏压,低温,距离样品远,解释合理;低米勒指数金属表面原子级别分辨率,解释不了.

d. STM 的分子轨道理论 具体内容看不懂.隧道电流主要贡献来自针尖最外端原子 (~80%),为针尖效应提供了理论依据.

e. STM 矩阵元法 针尖波函数用到了多种原子波函数合并;指出  $P_z d_z^2$  的贡献,高分辨率来源于此.

f. STM 非微扰理论,如散射理论.

$$I(V) = \frac{e}{\pi\hbar} \int_{\mu_r - eV}^{\mu_r + eV} T(E) dE$$

$T$  是总的穿透系数

## 5. 简要概述一下 STM 的应用

### a. 表面成像

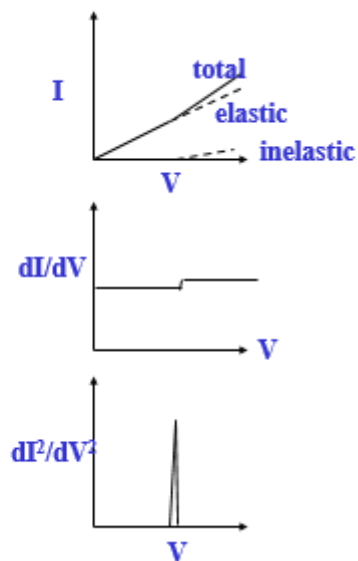
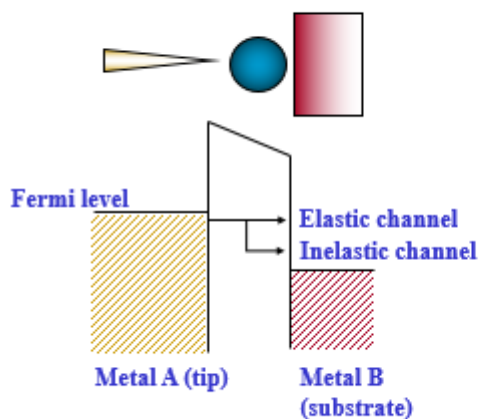
STM 看到的是样品表面的态密度及态分布; 正偏压看到的是 LUMO; 负偏压看到的是 HOMO.

### b. 原子, 分子操纵

在衬底表面上操纵粒子的位置. 可以观察到量子海市蜃楼现象; 可以操纵单分子反应; 可以探讨过渡金属催化机理.

### c. 扫描隧道谱

## Theory of (IETS) Inelastic electron tunneling spectroscopy



$$I \propto \int_0^{eV} \rho_s(E_F - eV + E) \rho_t(E_F + E) dE$$

针尖在  $E_F$  处 DOS 不变

$$I \propto \int_0^{eV} \rho_s(E_F - eV + E) dE$$

偏压从负到正扫描

$I \sim V$  反应的是样品的电导性质

$dI/dV \propto \rho_s$  反应了样品表面电子态的信息. 利用这个可以对样品表面电子态直接成像, 如同 ARPES 一样, 不同偏压下成像, 反应的是 E 维度上的 DOS 性质

$d^2I/dV^2 \sim V$  反应了样品振动能级非弹性隧穿过程. 如分子双键, 其键合振动只有在能量大于一定值之后 (这里表现为偏压大于一定值) 后才能发生, 提供额外的隧穿电流. 这个电流一般很小, 从而只有二阶的 STS 谱才能看到.

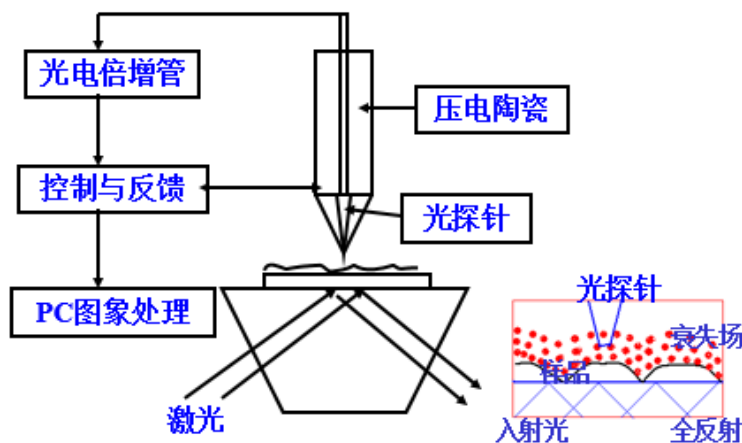
可以利用单分子振动谱探测分子结构.

### d. 分子电子学中应用

用 STM 移动分子或者原子构成单分子器件? 有点扯.

## 6. SPM 的种类

### a. 光子扫描隧道显微镜 (PSTM Photon STM)

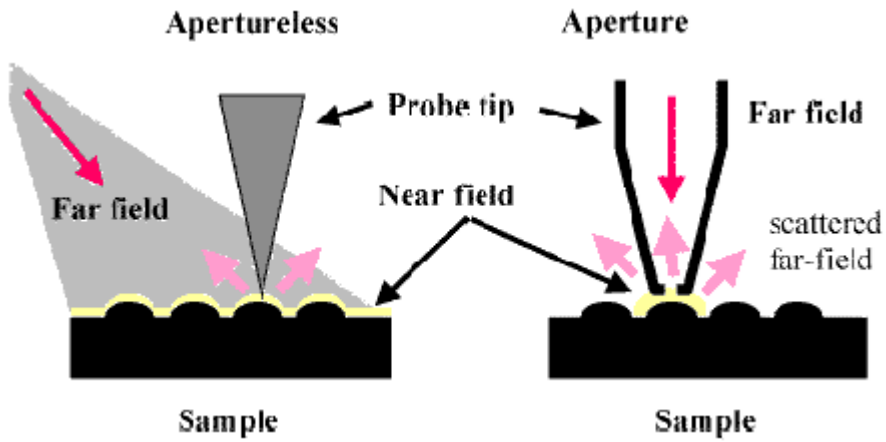


光子的隧道效应, 亚波长级分辨

### b. 扫描近场光学显微镜 (SNOM Scanning Near-field Optical Microscope)

光子与样品作用产生损失场, 检测损失场中的光波的性质可以得到样品表面的性质. 为何损失场可以弥补光波长几百纳米的不足而可以达到原子级别的分辨, 不懂; 具体工作原理的推导计算, 不懂.





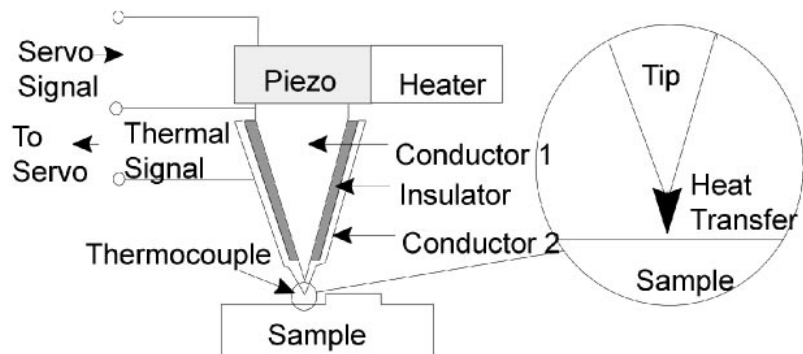
c. 弹道电子发射显微术 (BEEM Ballistic Electron Emission Microscope)

按照 STM 的工作原理，当探针与样品之间的距离非常接近时，由于探针的电势场高于样品，探针会向样品发射隧道电子。这些隧道电子进入样品到达界面时，虽然大部分电子的能量由于已经衰减而被界面的势垒反弹回来，但是仍有少数能量较高的电子能够穿透界面到达下层材料，这些穿透过界面的电子称为弹道电子。由于弹道电子在穿透界面时携带了许多有关界面的信息，因此 BEEM 为界面的研究提供了有价值的信息。

d. 扫描离子电导显微镜 (SICM Scanning Ion-Conductance Microscope)

对于不导电的样品，针尖用离子的溶液组成，针尖与样品之间的距离以离子的通过来反馈。

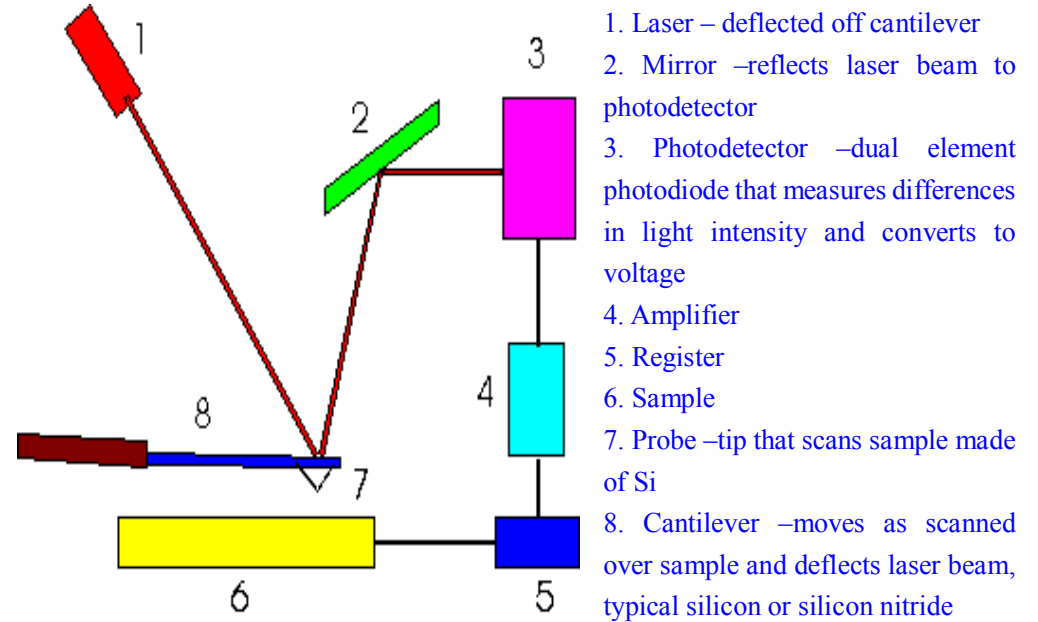
e. 扫描热显微镜 (SThemM Scanning Thermal Microscope)



热电偶检测样品表面温度，产生电流激发压电晶体导致位移。

f. 原子力显微镜 (AFM, 摩擦离显微镜、化学力显微镜, 磁力显微镜, 静电力显微镜,

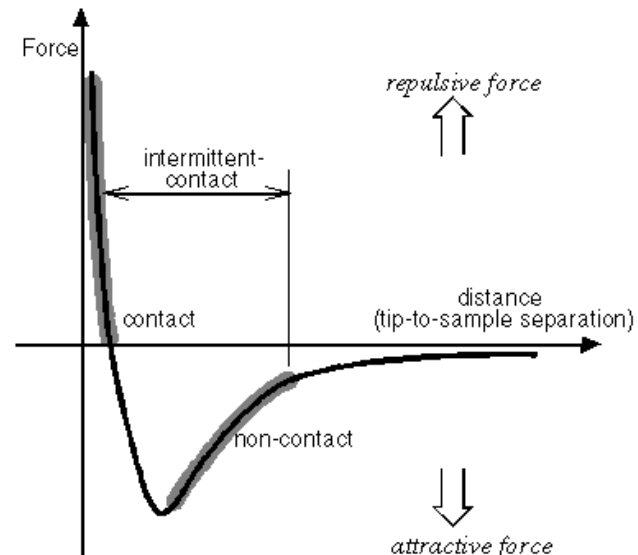
激光力显微镜...)



1. Laser – deflected off cantilever
2. Mirror – reflects laser beam to photodetector
3. Photodetector – dual element photodiode that measures differences in light intensity and converts to voltage
4. Amplifier
5. Register
6. Sample
7. Probe – tip that scans sample made of Si
8. Cantilever – moves as scanned over sample and deflects laser beam, typical silicon or silicon nitride

括号中的子类别以针尖与样品之间作用力或者方式区分。

7. 原子力显微镜 (AFM) 的工作模式及应用



### a. Contact Mode

Measures repulsion between tip and sample

Force of tip against sample remains constant

Feedback regulation keeps cantilever deflection constant

Voltage required indicates height of sample

Problems: excessive tracking forces applied by probe to sample

### b. Non-Contact Mode

Measures attractive forces between tip and sample

Tip doesn't touch sample

Van der Waals forces between tip and sample detected

Problems: Can't use with samples in fluid

Used to analyze semiconductors

Doesn't degrade or interfere with sample- better for soft samples

### c. Tapping Mode

Tip vertically oscillates between contacting sample surface and lifting of at frequency of 50,000 to 500,000 cycles/sec.

Oscillation amplitude reduced as probe contacts surface due to loss of energy caused by tip contacting surface

Advantages: overcomes problems associated with friction, adhesion, electrostatic forces

More effective for larger scan sizes

## 专题三 玻色-爱因斯坦凝聚

### 1. 经典统计分布函数的公式推导!

一个绝热系统处在势场中, 存在实空间与动量空间合计六个自由度:

$x, y, z, p_x, p_y, p_z \rightarrow x + dx, y + dy, z + dz, p_x + dp_x, p_y + dp_y, p_z + dp_z$

$dN = N_0 (2\pi mkT)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_K + E_P}{kT}} dx dy dz dp_x dp_y dp_z$ ,  $N_0 : E_P = 0$  处单位体积粒子数

$E_K$ : 动能  $E_P$ : 势能  $E_K = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$  对动量积分可以得到:

$dN' = N_0 e^{-\frac{E_P}{kT}} dx dy dz$  单位体积内的粒子数  $N = N_0 e^{-\frac{E_P}{kT}}$  波尔茨曼分布

对多自由度体系, 按自有度的能量分配定理. 自由度  $i, \varepsilon_i \propto p_i^2, \varepsilon_i = b p_i^2$

$$\frac{1}{\varepsilon_i} = \frac{\int e^{-E_i/kT} \varepsilon_i dp_i}{\int e^{-E_i/kT} dp_i} = \frac{b \int e^{-p_i^2 b \beta} p_i^2 dp_i}{\int e^{-p_i^2 b \beta} dp_i} = \frac{\sqrt{\pi / b \beta}}{2 \sqrt{\pi / b \beta^3}} = \frac{1}{2\beta} = \frac{1}{2} kT$$

一个服从经典统计的系统处于温度  $T$  的热平衡中, 其能量的每一独立的平方项都有平均值  $1/2kT$ .

例如, 自由电子与质子构成的等离子体, 虽然它们质量不同(相当于  $b$  不同), 但平均动能相等.

如果粒子动力学只允许分立能量, 例如量子谐振子:  $E = nhv$

$$E = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nhv \exp(-nhv / kT)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-nhv / kT)} = \frac{hv}{\exp(hv / kT) - 1}$$
 普朗克能量均分定理

具体计算过程草稿纸上画画应该能出来.

### 2. 量子统计分布函数的公式推导!

两个全同粒子,  $\alpha, \beta$

$$\Psi_B(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(1)\Psi_\beta(2) + \Psi_\alpha(2)\Psi_\beta(1)]$$

$$\Psi_F(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_\alpha(1)\Psi_\beta(2) - \Psi_\alpha(2)\Psi_\beta(1)]$$

$$\alpha = \beta \Rightarrow \begin{cases} \Psi_B(1,2) = \sqrt{2}\Psi_\alpha(1)\Psi_\beta(2) \text{ 两个波色子处} \\ \text{于相同状态的几率是经典几率的二倍} \\ \Psi_F(1,2) = 0 \text{ 也就是Pauli不相容原理} \end{cases}$$

推广到  $n$  个全同粒子(波色子),  $n$  个波色子处于相同状态的几率  $n!$  倍于其经典几率

将一个波色子放在一个态中, 这个几率与态中原有的波色子数目的关系:

$$\text{经典 } P_n^c = (P_1)^n \quad \text{量子 } P_n^B = n!P_n^c = n!(P_1)^n; P_{n+1}^B = (n+1)!P_{n+1}^c = (n+1)P_n^B$$

再放一个的几率是相应经典几率的  $(n+1)$  倍, 增强因子  $(1+n)$

如果费米子, 增强因子是  $(1-n)P_1, (n=0,1)$  交替变化

在处于平衡的体系中考虑两个能级  $i$  与  $j$ , 上面分别有  $n_i$  及  $n_j$  个粒子。

$$\text{令 } R_{i \rightarrow j} \text{ 代表从 } i \text{ 到 } j \text{ 的跃迁几率。精细平衡: } \begin{matrix} n_i \leftrightarrow n_j \\ R_{i \rightarrow j} & R_{j \rightarrow i} \end{matrix} \quad n_i R_{i \rightarrow j} = n_j R_{j \rightarrow i}$$

$$\text{经典统计 } \frac{n_i}{n_j} = \frac{R_{j \rightarrow i}^c}{R_{i \rightarrow j}^c} = e^{-(E_i - E_j)/kT} \text{ 对于波色子, 存在增强因子 } 1+n$$

$$R_{i \rightarrow j}^B = (1+n_j)R_{i \rightarrow j}^c = R_{j \rightarrow i}^B = (1+n_i)R_{j \rightarrow i}^c \rightarrow \frac{n_i}{n_j} = \frac{R_{j \rightarrow i}^B}{R_{i \rightarrow j}^B} = \frac{1+n_i}{1+n_j} e^{-E_i/kT}$$

$$\rightarrow \frac{n_i}{1+n_i} e^{-E_i/kT} = \frac{n_j}{n_j+1} e^{-E_j/kT} = e^{-\alpha(T)}; \alpha \text{ 只与温度有关的常数}$$

$$\rightarrow n^B(E) = \frac{1}{e^\alpha e^{E/kT} - 1} \text{ 波色 - 爱因斯坦分布函数}$$

$$\text{有 } \int_0^\infty n^B(E) N(E) dE = N \quad N \text{ 总粒子数 } N(E) \text{ 态密度}$$

如果是费米子, 上述过程用  $(1-n)$  取代  $(1+n)$ , 得到:

$$\frac{n}{1-n} e^{-E/kT} = e^{-\alpha(T)} \quad n^F(E) = \frac{1}{e^\alpha e^{E/kT} + 1} \text{ 费米 - 狄拉克分布函数}$$

对自由电子, 令  $e^\alpha = e^{-\epsilon_F/kT}, \epsilon_F$ : 化学势, Fermi 能级

$$n^F(E) = \frac{1}{e^{(E-\epsilon_F)/kT} + 1} \quad n^F(\epsilon_F) = \frac{1}{2} \text{ (化学势的分布)}$$

推导完毕.

### 3. 什么是玻色-爱因斯坦凝聚 (BEC) ?

理解角度 1: 从波色爱因斯坦分布函数  $n^B(E) = \frac{1}{e^\alpha e^{E/kT} - 1}$  可知, 对于完美的波色

子(实验中使用 Li, Na, Rb 原因在于它们拥有小的磁矩, 可以通过磁矩降温法降温到接近零 K, 另一个原因是原子之间的排斥力非常小, 可以凝聚在一起), 当温度为零的时候, 能量  $E$  若非无穷小则粒子在其上的占据概率为零, 从而所有的粒子均坍塌到能量无穷小的那个能级上.

理解角度 2: 德布罗意认为, 所有的粒子即是波又是粒子. 当温度高的时候, 粒子的波动性很弱很弱(乱七八糟动来动去), 相互之间木有耦合; 当温度足够低, 低到接近绝对零度的时候, 粒子不动了, 其波动性变得很强, 相互之间耦合作用大大增强. 可以用以下图像来理解: 温度高的时候各自为政, 温度低的时候所有粒子合在一块形成一个波.

### 4. BEC 实验中, 降低温度的办法有哪些?

其他传统的空气压缩冷却, 离子升华冷却等均无法达到接近于绝对零度的温度. 实验中搭建的冷原子台(潘建伟)使用的是激光冷却.

什么是激光冷却?

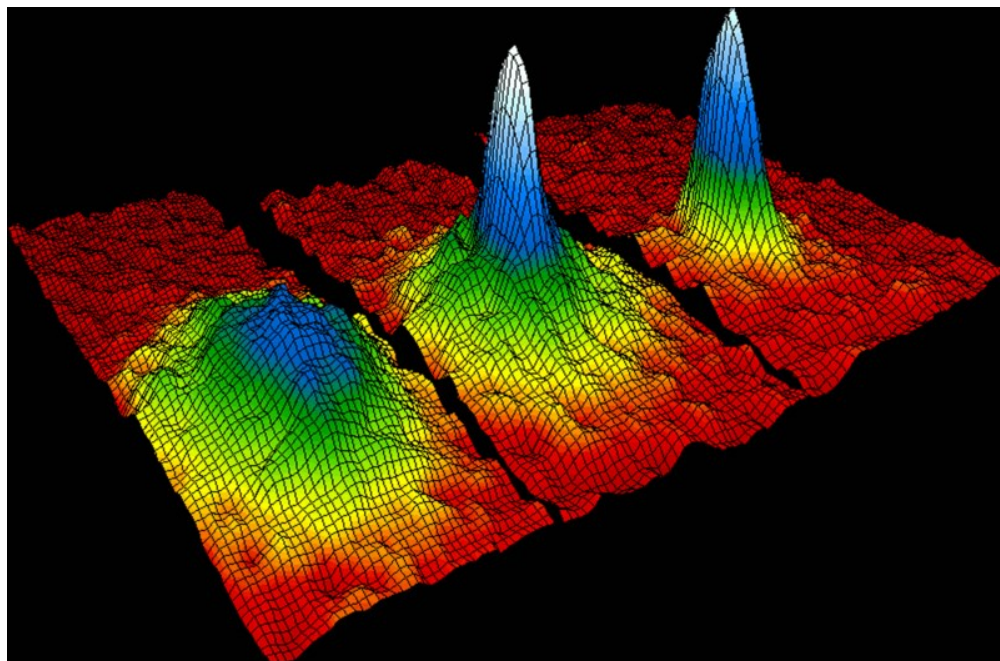
简单的说就是用六束激光从  $xyyz$  掐住一团粒子, 然后不停的用光子去轰击原子, 使得原子将本来高的动能转移到光子上带出去, 失去能量的原子, 其温度渐渐降低.

当然, 仅仅使用这一种方法是不够的. 利用多普勒效应, 迎着入射光入射方向运动的粒子会觉得入射光的频率高些; 背着入射光入射方向运动的粒子会觉得入射光的频率低些. 而粒子吸收光子后再能级跃迁发射的光子频率固定; 从而, 控制激光的频率, 让迎着其的原子吸收它, 再以高于激光的能量的光子跃迁发射出去, 这样就可以带走粒子的能量, 让粒子进一步温度降低. 这被称为激光陷阱. 通过这两步, 粒子的温度降

到了  $10\ \mu\text{K}$ , 不过对于 BEC 来说还是 too hot 了.

进一步用磁性陷阱方法. 强磁场下, 让粒子规规矩矩的按照一个方向排列, 自然也就让粒子不乱动, 从而降低了粒子的能量, 也就是进一步降低温度. 这可以将体系降温到  $1\ \mu\text{K}$  以下, 不过还是偏 hot.

最后一步, 用的是挥发冷却. 就像夏天狗伸舌头挥发水蒸气降温, 压缩体系, 让一部分高能粒子挥发出去, 剩下的就是温度低的; 如此循环几次, 可以将体系降温到及时 nK, 这个时候就可以看到明显的 BEC 现象了.



这幅图像显示的是铷原子速度的分布, 它证实了玻色-爱因斯坦凝聚的存在。图中的颜色显示多少原子处于这个速度上。红色表示只有少数原子的速度是该速度。白色表示许多原子是这个速度。最低速度显示白色或浅蓝色。从左到右  $400\text{nK}$   $200\text{nK}$   $50\text{nK}$ . 搭一个 BEC 台子需要约三年时间, 耗资几千万. 据说潘建伟同时搭了八个 BEC 台=.=

## 5. BEC 有哪些潜在应用?

原子激光器, 振荡器, 控制光速直到降为零, 研究原子光学, 原子光刻(制作分子级别器件), 精确原子时钟, 基础标准的另一种标度手段, 全息图, 光子纠缠与量子通信(潘建伟的组正在做), 量子计算机, 进一步从根本上理解量子力学, 超新星爆炸

模型, 黑洞模型.